新物理学シリーズ 18

山内 恭彦 監修

多体問題

筑波大学教授 理学博士

高野 文彦 著

培風館

はしがき

多体系を取り扱う数学的な方法の発展は著しく，物性論の分野でも極めてポピュラーなものになりつつある。たとえば，物理学会の物性基礎論・統計力学の分科における発表講演でも，Green 関数を使った話が非常に多く，Green 関数を知らなければ物理はわからないのではないか，また逆に Green 関数さえ知っていれば物理はすべて理解できるのではないかという極端な印象すらもちかねない勢いである。Green 関数自身は極めて有用な方法であることは間違いないにせよ，すべての問題に対して万能であるはずがなく，したがって適用限界のあることは明らかである。いろいろな体系における物理現象を解釈するには，むしろ他の方法の方が有用な場合も多いし，さらにいえば，Green 関数を使う人々がその本当の意味を十分に考慮しておられるのかどうかという失礼な印象すらもつ場合もある。

常々上のような感じをもたれている方も多くおられるようであり，また私自身も同感の場合が多かった。たまたま培風館から多体問題について方法論的な見地から書かないかというお誘いがあったので，東大物性研の中嶋貞雄先生のお智恵を拝借したりして，それならという気になったのが，この本を書く動機である。最初のうちは，あれもこれも書こうと盛り沢山な内容を考え，意気ごんで始めたのであったが，書き進むにつれ意外に大変なことがわかり，当初の計画は大分しぼんで余り自信のもてないものになった感じがしているが，何らかのお役に立てば幸いと思っている。

初めの動機が上述のようなことであったので，内容としては意識して Green 関数以外のことを多くしようと努めたつもりである。しかし全く省くわけにはゆかないので 6～8 章の 3 章をあてたが，なるべく基礎的な事項に限ることにしたつもりでいる。前にも述べたように，まだまだ書き足りないこともあるような気もするが，紙数の関係もあり一応打ち切ることにした。

執筆の依頼を受けたのはたしか昨年の 4 月頃かと思うが，初めは張り切れば 1 年もあれば大丈夫であろうと思っていたのが，昨年夏頃より勤務先の東京教育大の筑波への移転計画に参画することになってから急に忙しく

なり，執筆も思うにまかせなくなってしまった。培風館の村山高志氏には何度も引き延ばしをお願いして，とうとう半年も遅れてしまった。改めてお詫びするとともに，その御激励に感謝の意を表したいと思う。

1974 年 11 月

高野文彦

目　次

8. Green 関数に対する別の近似　155〜176

9. 素励起，集団運動　177〜196

10. 線形応答　197〜208

1. 多体問題とは

1-1 はじめに

多体問題とは，読んで字のごとく，多数の物体の運動を調べる問題である。Newton 力学では，地球と太陽のように二つの物体の運動を考える2体問題は正確に解けるが，これに月が加わった3体問題となると正確な解は一般には求められない。また量子力学においても，電子1個と原子核からなる水素原子に対する Schrödinger 方程式は正確に解けるが，電子が2個のヘリウム原子の状態になると正確には求められない。したがってこういう問題ではいろいろな近似をしなければならず，どういう近似方法を用いればよいかが問題になる。こういうわけで3体問題以上はすべて多体問題とよんでもよさそうである。

以上のように多体問題を広い意味にとれば，現代の物理学で取り扱う問題はすべて多体問題になってしまい，これら全部を解説することはまず不可能である。本書で取り上げる多体問題はもっと狭義なもので，物性論に現われるものに限ることにする。

物性論における多体問題と，上に述べた原子構造のような問題との違いは次の点にある。物性論で取り扱う量はすべて示量変数か示強変数とよばれるものである。すなわち，考える系の体積を Ω，その中に含まれている粒子数を N とするとき，$n=N/\Omega$ (粒子数密度)を一定に保って Ω と N を無限に大きくした場合，Ω または N に比例して大きくなる量が示量変数であり，Ω や N に関係なく一定値に近づくものが示強変数である(たとえば系の全エネルギーとか自由エネルギー，エントロピーなどは示量変数であり，圧力，温度，密度などは示強変数である)。これらの量を求めるときは，N または Ω について最高次のものだけを考え，低次の項は無視し

てよい。いいかえると表面の存在は考えず，無限に広がった系を考えればよいのである。これが原子や原子核の問題との本質的な違いである。

物性論における多体問題といっても，対象とする系が上に述べたように無限に広がっているものとするだけなら，物性論の問題はすべて多体問題といえそうである。しかしほとんどは，系の構成粒子は適当なポテンシャルの中で独立に運動しているか，もし粒子間に相互作用があっても簡単な形で容易に解くことができるものと仮定してよい。たとえば金属中の伝導電子は，イオンのつくる周期的なポテンシャル中を互いに独立に運動していると考えて，金属の性質を定性的に説明できる。また固体中の原子は互いに力を及ぼし合っているが，絶対零度ではこの相互作用のポテンシャル・エネルギーが最小の点に静止しており(ただし量子力学的な零点振動は存在している)，温度が上がるとこの平衡点のまわりで微小振動を行ない，この振動は相互作用のため結晶中を波として伝播すると考え，固体のいろいろな性質を定性的に説明できる。こういう問題は明らかに多体問題とはいえない。これに対し粒子間の相互作用を考えなければどうしても説明できない問題がいくつかある。もちろん金属内電子の問題でも，固体内の原子の振動の問題でも，定量的に実験事実を説明しようとすると，電子間または原子間の相互作用を考えなければならない。しかし本書で取り扱う多体問題とは，定性的にも，初めから相互作用を考慮しなければならない問題に限ることにする。

以上の意味での多体問題では，物質のある性質を説明するには，構成粒子の間にどんな相互作用があればよいか，またはその逆に構成粒子間の相互作用がわかっているとき，その系にどんな性質が期待されるかを議論することになる。その際いろいろな数学的方法がそれぞれの問題に対して適用され，それ相応の成果をあげている。これらの方法の中には相当特殊なものもあるが，一般的で多くの問題に適用されているものもある。本書では，物性論における多体問題を方法論的な観点から取り上げ，かなり一般性のある方法について解説することにする。この章ではまず予備的な事項を説明し，その後対象とする系について簡単な解説を与える。

1-2 ハミルトニアンと密度行列

ハミルトニアン 物性論で対象とする系は，非相対論的な取り扱いで十

分なものが多く，系のハミルトニアンとしては

$$H=\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}_j{}^2+U(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N) \qquad (1)$$

の形を考える。ただし系はただ一種の粒子から成るものとし，その質量を m，総数を N とし，各粒子の運動量と位置ベクトルをそれぞれ $\boldsymbol{p}_1, \boldsymbol{p}_2, \cdots, \boldsymbol{p}_N$，および $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N$ と書いた。粒子が二種類以上の場合を考えることもあるが，その場合への拡張は容易である。(1) の第一項は運動エネルギー，第二項はポテンシャル・エネルギーを表わすが，ポテンシャル・エネルギー U は位置座標だけの関数とする(例外的に運動量による場合もある)。さらに U は1粒子に働くポテンシャルと，2粒子間に働く相互作用ポテンシャルの和として表わされる場合だけを考える (いわゆる3体力以上は考えない)。すなわち

$$U(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=\sum_{j=1}^{N}v_1(\boldsymbol{r}_j)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq}^{N}\sum_{j=1}^{N}v_2(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j) \qquad (2)$$

と書けるものとする。さらに相互作用のポテンシャル $v_2(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j)$ は，$\boldsymbol{r}_i$ と $\boldsymbol{r}_j$ の距離のみの関数 $v_2(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|)$ の場合が多いが，ここでは一応(2)の形で話を進める。

(1)のハミルトニアンは，各粒子のスピン変数を含んでいないが，外から磁場 $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})$ がかかっているような場合には，j 番目の粒子のスピン角運動量を $\hbar\boldsymbol{S}_j$ と書くと*，次のようなスピン変数を含んだ項がつけ加わる。

$$-\mu\sum_{j}\boldsymbol{S}_j\cdot\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r}_j) \qquad (3)$$

ただし $\mu\boldsymbol{S}_j$ をスピンによって生ずる磁気モーメントとした。

さて統計力学の一般的な処法によると，系の熱平衡における性質は，**状態和**

$$Z_N=\sum_{n}e^{-\beta E_n}, \qquad \beta=1/k_{\mathrm{B}}T \qquad (4)$$

からすべて求められる。ただし k_{B} は Boltzmann 定数，T は絶対温度である。E_n はハミルトニアン(1)の固有値で，Schrödinger 方程式**

$$H\Psi_n(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=E_n\Psi_n(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N) \qquad (5)$$

を，波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)$ に対する適当な境界条件の下で解いて得られる。境界条件としては，**周期的境界条件**とよばれるものを使うことが多

*　$\hbar=h/2\pi$　(h はプランクの定数)

**　以下の議論では，スピン変数をあらわには示さないが，必要なときは含まれているものと理解してほしい。

い。それは系の占める空間は，1辺が L の立方体($L^3=\Omega$：体積)であると考え，この立方体の各辺の方向について $\Psi_n(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$ が周期 L の周期関数であるとするものである。つまり立方体の3辺の方向を表わす単位ベクトルを $\boldsymbol{e}_\alpha(\alpha=1, 2, 3)$ とすると

$$\Psi_n(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_j+pL\boldsymbol{e}_\alpha, \cdots, \boldsymbol{r}_N)=\Psi_n(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_j, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$$

が成り立つものとする。ただし p は任意の整数である。他の境界条件もとることもできるが，**1-1** で述べたように表面効果を考えなければ同じ結果を与える。

(4),(5)を，もっと取り扱いやすい形に

$$Z_N=\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H}] \tag{6}$$

と書くことができる。Tr は**跡**(trace, spur)とよばれる演算子で，Tr A は行列 A の対角成分の和をとったものである。

$$\mathrm{Tr}\,A=\sum_n A_{nn}$$

(4)の形は，(5)を解かなければ計算できないのに対し，(6)の形は $e^{-\beta H}$ の行列要素をどんな完全直交関数で書いてもよいので便利である〔Tr はユニタリー(unitary)変換に対して不変である〕。

密度行列　状態和 Z の他に，次の形の演算子を定義しておくと便利なことが多い。それは

$$(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N|\rho_N|\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N')=\sum_n e^{-\beta E_n}\Psi_n^*(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$$
$$\times\Psi_n(\boldsymbol{r}_1', \cdots, \boldsymbol{r}_N')/Z_N \tag{7}$$

で定義されるもので，**密度行列**(density matrix)とよばれるものである。(7)は

$$\rho_N=e^{-\beta H}/Z_N \tag{7$'$}$$

という演算子の座標表示であり，明らかに

$$\mathrm{Tr}\,\rho_N=1 \tag{8}$$

を満足している。この密度行列を使えば，系の任意の物理量 $A(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_N)$ の熱平衡における値 $\langle A\rangle$ は次のようにして求められる。

$$\langle A\rangle=\frac{1}{Z_N}\sum_n e^{-\beta E_n}\int\cdots\int d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N\Psi_n^*(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$$
$$\times A(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N\,;\boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_N)\Psi_n(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$$
$$=\frac{1}{Z_N}\sum_n e^{-\beta E_n}(\Psi_n,\ A\Psi_n)$$
$$=\mathrm{Tr}\,[\rho_N A] \tag{9}$$

ただし A に含まれる $\boldsymbol{p}_j$ は $(\hbar/i)\partial/\partial\boldsymbol{r}_j$ という微分演算子にすることはいうまでもない。

我々が必要な物理量 A としては，1粒子の変数だけを含む項，および2粒子の変数だけを含む項の和として書かれているものが多い〔(1)，(2)のハミルトニアン自身がそうであった〕。つまり

$$A=\sum_{j=1}^{N}a_1(\boldsymbol{r}_j,\boldsymbol{p}_j)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq}^{N}\sum_{j=1}^{N}a_2(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_j;\boldsymbol{p}_i,\boldsymbol{p}_j) \tag{10}$$

という形に表わされるものが多い。この場合 ρ_N 自身ではなく，もっと変数の数が少ないものを用いることができる。たとえば A が(10)の第一項だけだとすると，(9)は

$$\langle A\rangle=\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{Z_N}\sum_n e^{-\beta E_n}\int\cdots\int d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N\Psi_n^*(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)$$
$$\times a_1(\boldsymbol{r}_j,\boldsymbol{p}_j)\Psi_n(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)$$

となるから，(7)の ρ_N で $\boldsymbol{r}_j$ を除いた他の変数について跡をとったもの，すなわち

$$\int\cdots\int d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_{j-1}d^3\boldsymbol{r}_{j+1}\cdots d^3\boldsymbol{r}_N$$
$$\times(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_{j-1},\boldsymbol{r}_j,\boldsymbol{r}_{j+1},\cdots,\boldsymbol{r}_N|\rho_N|\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_{j-1},\boldsymbol{r}_j',\boldsymbol{r}_{j+1},\cdots,\boldsymbol{r}_N)$$
$$=(\boldsymbol{r}_j|\rho_j'|\boldsymbol{r}_j') \tag{11}$$

と定義すると，

$$\langle A\rangle=\sum_{j=1}^{N}\mathrm{Tr}_{(j)}[\rho_j'a_1]$$

と書ける。ただし $\mathrm{Tr}_{(j)}$ は j 番目の粒子の座標について跡をとることを表わす。一般に(11)で定義された ρ_j' は，どの粒子をとっても同じ形をしている。つまりその関数形は j によらないことを示すことができる*。そこでその共通の関数を ρ_1/N と書き，

$$(\boldsymbol{r}|\rho_1|\boldsymbol{r}')=N\int\cdots\int d\boldsymbol{r}_1\cdots d\boldsymbol{r}_{j-1}d\boldsymbol{r}_{j+1}\cdots d\boldsymbol{r}_N$$
$$\times(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_{j-1},\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_{j+1},\cdots,\boldsymbol{r}_N|\rho_N|\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_{j-1},\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_{j+1},\cdots,\boldsymbol{r}_N)$$
$$=N\,\mathrm{Tr}_{(N-1)}\,\rho_N \tag{12}$$

と定義すれば

$$\langle A\rangle=\mathrm{Tr}\,[\rho_1a_1] \tag{13}$$

---

* 次節で述べる波動関数の対称性を考慮すればこれは当然であるが，そうでない場合にも，ハミルトニアンがすべての粒子の入れかえに対して対称ならば，(7)で n についての和をとった後は，ρ_N は対称になることが示される。

と書ける。(12) の $\mathrm{Tr}_{(N-1)}$ は $N-1$ 個の変数について跡をとることを表わし，ρ_1 の 1 は 1 粒子の変数だけを含むことを表わす。この ρ_1 を **1 体の密度行列**とよぶ。

同様に一般に m 粒子に対する密度行列を

$$\rho_m = \frac{N!}{(N-m)!}\,\mathrm{Tr}_{(N-m)}\,\rho_N \tag{14}$$

で定義すると，たとえば (10) の形の物理量 A の熱平衡の値は

$$\langle A \rangle = \mathrm{Tr}\,[\rho_1 a_1] + \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\,[\rho_2 a_2] \tag{15}$$

という形で表わされることになる。

1-3 波動関数の対称性と，Fermi および Bose 粒子

Schrödinger 方程式 (5) を解くときに，考慮しなければならない重要なことがある。それは系が同じ粒子からできており，それらの粒子は互いに区別できないということである。こういう系の波動関数 Ψ は，それがハミルトニアンの固有関数であろうとなかろうと，次の対称性を満たさねばならない。粒子がスピン自由度をもっているときは，スピン変数を ζ で表わし，$\boldsymbol{r}$ と ζ をまとめて x と書くことにすると，Ψ は一般に $x_1, \cdots, x_N$ の関数であるが，この N 個の変数の任意の 2 個を入れかえたとき，Ψ は前と同じであるか，または単に符号を変えるだけである。すなわち二つの変数 x_i と x_j を交換する演算子を $P_{(ij)}$ と書くと

$$P_{(ij)}\Psi(x_1, \cdots, x_i, \cdots, x_j, \cdots, x_N) = (\pm 1)\Psi(x_1, \cdots, x_N) \tag{16}$$

となる*。

(16) の $+$，$-$ のどちらをとるかは，粒子の種類によってきまっており，前者を **Bose**（ボーズ）**粒子**，後者を **Fermi**（フェルミ）**粒子**とよぶ。一般にスピンの大きさが 0, 1, 2, ⋯ のような整数値である粒子（光子，α 粒子など）は Bose 粒子であり，1/2, 3/2, ⋯ というような半整数値のもの（電子，陽子，中性子など）は Fermi 粒子である。また何個かの粒子からなる複合粒子は，中に含まれている Fermi 粒子の数が奇数ならば Fermi

---

* ややむずかしくいうと，すべての変数のおきかえは群をつくり（置換群とよばれる），波動関数 Ψ はこの置換群の 1 次元表現をつくっているものに限られるということになる（p. 7 参照）。

粒子，偶数ならば Bose 粒子と考えることができる。たとえばふつうのヘリウム原子は，原子核は α 粒子で Bose 粒子，これに Fermi 粒子である電子が2個ついて全体としては Bose 粒子である。これに対し，これの同位体 He^3 の原子核は陽子2個，中性子1個からなるので Fermi 粒子であり，したがって He^3 の原子も Fermi 粒子である。

(16)をもっと一般的な形にしておこう。一般に $\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N$ の N 個のものの任意の順序に並べかえる演算子を P で表わす (置換)。この演算の個数は，前と同じ順序のままで実際には並べかえはしないものまで含めて $N!$ 個であるが，この中のどの P をとっても適当な $P_{(ij)}$ の積で表わすことができる*。この表わし方は一意的ではないが，積に現われる $P_{(ij)}$ の個数が偶数か奇数であるかは P によってきまっている。これが偶数の置換を偶置換，奇数のものを奇置換とよぶが，これを区別するのに ϵ_P という文字を使い，$\epsilon_P=0$ が偶置換，1が奇置換とする。すると(16)より

$$P\Psi(\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N) = (\pm 1)^{\epsilon_P}\Psi(\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N) \tag{17}$$

が成り立つことは明らかである。右辺の±は，Bose 粒子のときは＋，Fermi 粒子のときは－をとるものとしておく。

任意の波動関数の表わし方 さて任意の状態を表わす波動関数 Ψ は，ある完全規格直交関数系 $\{\Phi_n\}=\{\Phi_0, \Phi_1, \cdots\}$ を使って

$$\Psi = \sum_n C_n \Phi_n \tag{18}$$

という形に展開できる。それでは多体系では $\{\Phi_n\}$ としてどのようなものを使えばよいであろうか。それには，任意の Hermite (エルミート) 演算子の固有関数は完全規格直交関数系をつくることを用いればよい。そこで

$$H_0 = \sum_{j=1}^{N} h_1(\boldsymbol{p}_j, \boldsymbol{r}_j, \boldsymbol{S}_j) \tag{19}$$

という1粒子に対する演算子 h_1 の和として表わされるハミルトニアン H_0 を使って，それの固有関数 Φ_n を使えばよい。つまり

$$H_0\Phi_n = W_n\Phi_n \tag{20}$$

を満たす $\Phi_n(\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N)$ を用いる**。

(20)を満たす Φ_n は形式的には次のようにして求めることができる。まず(19)の1粒子に対する演算子 h_1 の規格化された固有関数を $\varphi_k(\boldsymbol{x})$ とする。つまり

---

* ここの議論は証明なしに進めるが，詳しい証明は適当な群論の教科書の置換群の所を参照してほしい。

** 境界条件はもちろん(5)に対するものと同じにしておく。

$$h_1\varphi_k(x)=\epsilon_k\varphi_k(x) \tag{21}$$

すると

$$\Phi_n'(x_1, \cdots, x_N)=\varphi_{k_1}(x_1)\cdots\varphi_{k_N}(x_N) \tag{22}$$

は(20)を満たし，W_n は

$$W_n=\sum_{j=1}^{N}\epsilon_{k_j} \tag{23}$$

で与えられることがわかる。この場合，全系の状態を指定する量子数 n としては，$(k_1, \cdots, k_N)$ という1粒子状態の量子数 N 個の集合(ただし順序づけをしてある)である。しかし(22)の Φ_n' は(16)または(17)の対称性を満たしていない。(18)の波動関数 Ψ はこの対称性を満たしているべきであるから，Φ_n としても初めから対称性を満たしているものを使った方が便利である。それには(22)を使って

$$\Phi_n=\frac{1}{\sqrt{N!\prod_k n_k!}}\sum_P(\pm1)^{\epsilon_P}P[\varphi_{k_1}(x_1)\cdots\varphi_{k_N}(x_N)] \tag{24}$$

とすればよい。ただし右辺の和は $N!$ 個の置換すべてについての和であり n_k は右辺の $[\cdots]$ の中に同じ φ_k が現われる個数である。(24)の Φ_n を指定する n はやはり $k_1, \cdots, k_N$ の集合であるが，今度は集合の中の順序は区別しないもので，これを $\{k_1, \cdots, k_N\}$ と表わすことにする。

(24)の Φ_n が規格化され，互いに直交していること，つまり

$$\int\cdots\int dx_1\cdots dx_N\Phi_n^*(x_1, \cdots, x_N)\Phi_{n'}(x_1, \cdots, x_N)=\delta_{nn'} \tag{25}$$

が成り立つことは，φ_k が規格化されており，互いに直交していること，

$$\int dx\varphi_k^*(x)\varphi_{k'}(x)=\delta_{kk'} \tag{26}$$

を使えば容易に確かめられる。ただし $\int dx$ は空間座標についての積分，およびスピン変数についての和

$$\int dx=\int d^3\boldsymbol{r}\sum_\zeta$$

を表わす。また(25)の右辺の $\delta_{nn'}$ は，n と n' が集合として一致するときは1，一致しないときは0を表わす*。(26)の $\delta_{kk'}$ も同じで

$$\delta_{kk'}=\begin{cases}1 & (k=k')\\ 0 & (k\neq k')\end{cases} \tag{27}$$

* ただし(24)の Φ_n をつくるとき，最初の $k_1, \cdots, k_N$ の並べ方はある順序に指定しておくものとする。

を表わす〔Kronecker(クロネッカー)のデルタ〕。

次に $\boldsymbol{\Phi}_n$ の完全性について考える。$\varphi_k(x)$ は，(21)で示したように Hermite 演算子 h_1 の固有関数であるから，完全系をつくる。つまり

$$\sum_k \varphi_k^*(x)\varphi_k(x')=\delta(x-x')=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta_{\zeta\zeta'} \tag{28}$$

ここで $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ は $\boldsymbol{r}\neq\boldsymbol{r}'$ のときは0で，$\boldsymbol{r}$ または $\boldsymbol{r}'$ について全空間で積分すれば1になるという関数で，Dirac(ディラック)のデルタ関数とよばれる。(28)を使えば $\boldsymbol{\Phi}_n$ に対し

$$\sum_n \boldsymbol{\Phi}_n^*(x_1,\cdots,x_N)\boldsymbol{\Phi}_n(x_1',\cdots,x_N')$$
$$=\frac{1}{N!}\sum_P(\pm1)^{\epsilon_P}P[\delta(x_1-x_1')\cdots\delta(x_N-x_N')] \tag{29}$$

が成り立つことが示される。ただし左辺の $\sum_n$ は $\{k_1,\cdots,k_N\}$ のあらゆる集合についての和であり，右辺の P は $[\cdots]$ 内の $x_1,\cdots,x_N$ の置換を表わす。

(24)の $\boldsymbol{\Phi}_n$ は，Fermi 粒子系の場合は，実は次の行列式と全く同じである。

$$\boldsymbol{\Phi}_n=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\varphi_{k_1}(x_1) & \varphi_{k_2}(x_1) & \cdots & \varphi_{k_N}(x_1)\\ \varphi_{k_1}(x_2) & \varphi_{k_2}(x_2) & \cdots & \varphi_{k_N}(x_2)\\ & \cdots & \cdots & \\ \varphi_{k_1}(x_N) & \varphi_{k_2}(x_N) & \cdots & \varphi_{k_N}(x_N)\end{vmatrix}$$
$$=\frac{1}{\sqrt{N!}}\det(\varphi_{k_i}(x_j)) \tag{30}$$

Fermi 粒子の場合は，$k_1,\cdots,k_N$ の中に同じものがあれば $\boldsymbol{\Phi}_n$ は恒等的に0になってしまうので，そういう状態は実現されず〔Pauli(パウリ)原理〕，したがって(24)にある $\prod_k n_k!$ は1に等しい。

Bose 粒子系の場合も同じように(24)を

$$\boldsymbol{\Phi}_n=\frac{1}{\sqrt{N!\prod_k n_k!}}\det{}^{(+)}(\varphi_{k_i}(x_j)) \tag{31}$$

と書くことにする。$\det^{(+)}$ は，行列式では展開したとき正と負の項が現われるが，負の項をすべて正に変えたもので，行列式(determinant)に対して**パーマネント**(permanent)とよばれる。この $\boldsymbol{\Phi}_n$ を用いれば，体系の任意の波動関数 Ψ は(18)，つまり

$$\Psi(x_1,\cdots,x_N)=\sum_{\{k_1,\cdots,k_N\}}C\{k_1,\cdots,k_N\}\boldsymbol{\Phi}_{\{k_1,\cdots,k_N\}}(x_1,\cdots,x_N) \tag{32}$$

のように展開できる。ハミルトニアン H の固有状態の波動関数(5)も当然この形に書けるから，係数 $C\{k_1, \cdots, k_N\}$ を適当にきめればよいことになる。

1-4 独立粒子系の性質

前節で述べたように，多体系の波動関数は，系の構成粒子が Fermi 粒子か Bose 粒子かによって，行列式(30)またはパーマネント(31)で表わされる。とくに粒子間に相互作用がなく，各粒子が互いに独立に運動しているときには，系の波動関数は一つの行列式またはパーマネントで表わされる。こういう系の性質は，以下の議論での予備知識として必要なものが多いので，多くの本で詳しく説明されていることではあるが，ここで簡単なまとめをしておこう。

a) Fermi 粒子系

基底状態 Fermi 粒子は同じ状態*に2個以上入れない。したがって全系の基底状態は，1粒子状態にエネルギーの低い方から順番に粒子をつめてゆくことによってつくることができる。とくに自由粒子**の場合は1粒子の状態は運動量 $\boldsymbol{p}$ または波数ベクトル $\boldsymbol{k}(=\boldsymbol{p}/\hbar)$ で指定され，そのエネルギーは $\epsilon(\boldsymbol{p})$ と書けるので，これとの類似より運動量空間における粒子の分布を考えるのが便利である。また $\epsilon(\boldsymbol{p})$ は $\boldsymbol{p}$ の方向を定めると，$\boldsymbol{p}$ の大きさの単調増加関数であることが多いので，全系の基底状態は運動量空間で原点から順番に粒子をつめていって，ある所までつまった分布になっている。すると運動量空間は原点を中心として粒子のつまった部分と，その外側のつまっていない部分に分けられている。この二つの部分の境界面を **Fermi 面**とよび，とくに $\epsilon(\boldsymbol{p})$ が $\boldsymbol{p}$ の大きさだけの関数で，$\boldsymbol{p}$ の方向によらない場合は，粒子のつまった部分は球になり，これを **Fermi 球**とよぶ。Fermi 球の大きさは次のようにしてきめられる。運動量空間の単位体積に対しては，Ω/h^3 個の量子力学的状態が対応しているので***，

---

* 状態という言葉で，全系の状態をさす場合と，ここのように1粒子の状態をさす場合とがあるが，混同しないよう注意してほしい。

** ここで自由粒子とは，外から力が働いていない独立粒子のことで，ハミルトニアンが運動エネルギーだけの粒子をさす。

*** このことは，古典統計力学で位相空間の積分を $\int\cdots\int d^3\boldsymbol{p}d^3\boldsymbol{r}/h^3$ としたことに対応しており，また平面波 $e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$ が周期的境界条件を満たすためには，$\boldsymbol{k}$ の各成分が $2\pi/L$ の整数倍の値のみをとらねばならないことからも導出できる。

Fermi 球内部の状態の総数を N に等しいとおいて

$$(2S+1)\frac{\Omega}{h^3}\frac{4\pi}{3}p_{\mathrm{F}}{}^3=N \tag{33}$$

より Fermi 球の半径 p_{F} がきまる。ただし粒子のスピンの大きさを S とすると，スピンの向きについて $(2S+1)$ 個の自由度があり，同じ運動量の状態には $(2S+1)$ 個まで粒子が入りうるとした。

基底状態のエネルギー E_0 は

$$E_0=\sum_{\boldsymbol{p}\,(p<p_{\mathrm{F}})}\epsilon(\boldsymbol{p}) \tag{34}$$

で与えられるが，とくに $\epsilon(\boldsymbol{p})=p^2/2m^*$ で与えられるときは*

$$\frac{E_0}{N}=\frac{3}{5}\epsilon(p_{\mathrm{F}}) \tag{35}$$

になることは容易に確かめられる。

有限温度での性質　以上は基底状態，つまり 0 K における話であったが，有限温度では(4)の状態和 Z_N を計算しなければならず，励起状態の知識も必要になる。しかし状態和 Z_N よりも

$$\Xi=\sum_{N=0}^{\infty}e^{\beta\mu N}Z_N=\sum_{N=0}^{\infty}\sum_{n}e^{-\beta(E_n-\mu N)}=\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(H-\mu N)}\right] \tag{36}$$

で定義される大きな状態和を計算する方が便利である。ただし μ は化学ポテンシャルとよばれる量で，上式の最後の Tr は，N の違う空間についても和をとるもので，(6)の Tr とは違う意味をもっている。(36)の E_n, N は

$$E_n=\sum_{\boldsymbol{p},S}\epsilon(\boldsymbol{p})\,n_S(\boldsymbol{p}) \tag{37}$$

$$N=\sum_{\boldsymbol{p},S}n_S(\boldsymbol{p})$$

と書ける。$n_S(\boldsymbol{p})$ は運動量 $\boldsymbol{p}$，スピン S の状態を占めている粒子数で 0 または 1 の値をとる。したがって (36) の Tr はあらゆる $S, \boldsymbol{p}$ に対して $n_S(\boldsymbol{p})=0$ および 1 としたときの和をとればよいので

$$\Xi=\prod_{\boldsymbol{p},S}\left(1+e^{-\beta\{\epsilon(\boldsymbol{p})-\mu\}}\right) \tag{38}$$

となる。(38)を使えばいろいろな量の計算はすぐできる。たとえば $n_S(\boldsymbol{p})$ の平均値 $f_S(\boldsymbol{p})$ は

$$f_S(\boldsymbol{p})=f(\boldsymbol{p})=1/(e^{\beta\{\epsilon(\boldsymbol{p})-\mu\}}+1) \tag{39}$$

---

*　外部からの力を受けていない自由粒子のエネルギーと同じ形。ただし質量は外からの力や相互作用などのため，自由粒子の値とは違ってもよいとして m^* と書いた。これを**有効質量**(effective mass)という。

となり，これを使えば全エネルギー $U=\langle E_n\rangle$ は

$$U=\sum_{\boldsymbol{p},S}\epsilon(\boldsymbol{p})f_S(\boldsymbol{p})=(2S+1)\sum_{\boldsymbol{p}}\epsilon(\boldsymbol{p})f(\boldsymbol{p}) \tag{40}$$

全粒子数は

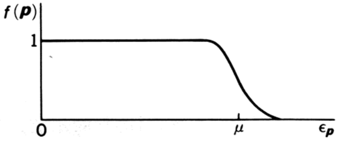
$$N=(2S+1)\sum_{\boldsymbol{p}}f(\boldsymbol{p}) \tag{41}$$

となる。その他エントロピー $\mathscr{S}$ は

$$\mathscr{S}=-(2S+1)k_{\mathrm{B}}\sum_{\boldsymbol{p}}[f(\boldsymbol{p})\log f(\boldsymbol{p})+\{1-f(\boldsymbol{p})\}\log\{1-f(\boldsymbol{p})\}] \tag{42}$$

で与えられる。

(39)の $f(\boldsymbol{p})$ (Fermi 分布関数)は 1·1 図に示すように，$\epsilon(\boldsymbol{p})<\mu$ で $\mu-\epsilon(\boldsymbol{p})\gg\beta^{-1}(=k_{\mathrm{B}}T)$ であるような $\boldsymbol{p}$ に対してはほとんど 1 で，$\epsilon(\boldsymbol{p})>\mu$ で $\epsilon(\boldsymbol{p})-\mu\gg k_{\mathrm{B}}T$ なる $\boldsymbol{p}$ に対してはほとんど 0 である。この性質を利用すれば，(40)以下の和の計算は容易に実行できる。そのためには $\boldsymbol{p}$ についての和を



1·1 図　Fermi 分布関数

$$\sum_{\boldsymbol{p}}\longrightarrow\frac{\Omega}{h^3}\int d^3\boldsymbol{p}$$

のように積分に変え，さらにエネルギー $\epsilon(\boldsymbol{p})$ の関数の和のときには

$$\rho(\epsilon)=\frac{\Omega}{h^3}\int d^3\boldsymbol{p}\,\delta(\epsilon(\boldsymbol{p})-\epsilon) \tag{43}$$

で**状態密度**を定義する。すると $\mu\gg k_{\mathrm{B}}T$ のときは，エネルギーや粒子数は次のように計算できる。

$$U=(2S+1)\int_0^{\mu}\epsilon\rho(\epsilon)\,d\epsilon+(2S+1)\frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2\frac{\partial}{\partial\epsilon}\{\epsilon\rho(\epsilon)\}\Big|_{\epsilon=\mu}+\cdots \tag{44}$$

$$N=(2S+1)\int_0^{\mu}\rho(\epsilon)\,d\epsilon+(2S+1)\frac{\pi^2}{6}(k_{\mathrm{B}}T)^2\frac{\partial\rho}{\partial\epsilon}\Big|_{\epsilon=\mu}+\cdots \tag{45}$$

N の式から μ を T の関数として求めれば，0 K では(33)の p_{F} を用いて

$$\mu(T=0)\equiv\mu_0=\epsilon(p_{\mathrm{F}}) \tag{46}$$

になる。有限温度のときは，

$$\mu=\mu_0-\frac{\pi^2}{6}\left(\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\mu_0}\right)^2\frac{\partial\log\rho(\epsilon)}{\partial\epsilon}\Big|_{\epsilon=\mu_0}+\cdots \tag{47}$$

となることがすぐに示される。するとエネルギー U は

$$U=E_0+(2S+1)\frac{\pi^2}{6}\left(\frac{k_BT}{\mu_0}\right)^2\{\mu_0{}^2\rho(\mu_0)\}+\cdots \qquad (48)$$

となる。E_0 は (35) に与えた基底状態のエネルギーである。(48) から比熱 $C=\partial U/\partial T$ は T に比例していることがわかり，同じような計算をすれば，スピン帯磁率は一定になることがわかる。

以上の話は $\mu_0 \gg k_BT$ の範囲で，このとき Fermi 系は**縮退**(degenerate) しているという。逆に $\mu_0 \ll k_BT$ のときはいろいろな性質は古典統計の場合に一致し，ほぼ理想気体と同じ性質を示す。

b) Bose 粒子系

独立な Bose 粒子系の基底状態は，最もエネルギーの低い 1 粒子状態に N 個の粒子をすべてつめこんだ状態である (簡単のため粒子のスピンは 0 とする)。有限温度における大きな状態和は Fermi 系と同じようにして求められ，

$$\Xi=\prod_{\boldsymbol{p}}(1-e^{-\beta\{\epsilon(\boldsymbol{p})-\mu\}})^{-1} \qquad (49)$$

となる。状態 $\boldsymbol{p}$ にある粒子数の平均は

$$f(\boldsymbol{p})=1/(e^{\beta\{\epsilon(\boldsymbol{p})-\mu\}}-1) \qquad (50)$$

で与えられる。(50) で与えられる Bose 分布関数の特徴は，$\epsilon(\boldsymbol{p})=\mu$ で f が無限大になってしまうことであり，したがって

$$\mu \leq \epsilon(\boldsymbol{p}=0) \qquad (51)$$

でなければならない。以下では $\boldsymbol{p}=0$ のエネルギー $\epsilon(\boldsymbol{p}=0)$ を 0 にとる。この式の等号が成り立つ場合は，$f(\boldsymbol{p}=0)=N_0$ は形式的に発散してしまうので，N_0 だけは特別扱いをして

$$N=N_0+\sum_{\boldsymbol{p}\neq 0} f(\boldsymbol{p}) \qquad (52)$$

と書き，第二項は積分に直して計算する。その積分が $\mu\to 0$ にしても収束する場合は，N がその収束値 N_1 より大きければ，$N_0=N-N_1$ としなければならない*。逆に積分が $\mu\to 0$ の極限で発散すれば N_0 は常に 0 としてよい。

このように $N_0\neq 0$，またはもっと正確には N_0/N が有限の場合を **Bose 凝縮**(Bose condensation) がおきているという。Bose 凝縮がおきるかおきないかは，(52) の第二項の和 (積分)，つまり

$$\int_0^\infty \rho(\epsilon)\frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1}d\epsilon=N_1 \qquad (53)$$

---

*　これは $-\mu$ が $1/N$ 程度の小さい量であることを意味する。

が，$\mu\to 0$ で収束するかどうかできまる。このことは $\epsilon=0$ の近くでの状態密度 $\rho(\epsilon)$ のふるまいからきまり，

$$\rho(\epsilon)\propto\epsilon^{l} \tag{54}$$

とすると，Bose 凝縮のおきる条件は $l>0$ となることがすぐわかる。$l>0$ のときの Bose 凝縮のおきる温度 T_λ は

$$N=\int_0^\infty \frac{\rho(\epsilon)}{e^{\beta_\lambda\epsilon}-1}d\epsilon \qquad (\beta_\lambda=1/k_{\mathrm{B}}T_\lambda) \tag{55}$$

からきまり，T_λ より低温では $N_0\neq 0$ になっている。

次に Bose 凝縮のおきる温度 T_λ ではどんなことがおきているかを調べてみる。まずエネルギー U は連続なことはすぐにわかる。実際 U は

$$U=\int_0^\infty \frac{\epsilon\rho(\epsilon)}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1}d\epsilon \tag{56}$$

で与えられ，$\mu\to 0$ としても不連続にはならない。つまり Bose 凝縮には潜熱は伴っていない。次に比熱 $C=\partial U/\partial T$ を計算すると，U の式(56)の中で温度によって変化するものは $\beta=1/k_{\mathrm{B}}T$ と μ である。β を通しての変化は $\mu<0$ でも $\mu=0$ でも同じであるが $\partial\mu/\partial T$ が $\mu\to 0\,(T\to T_\lambda+0)$ で有限であると，$\mu=0\,(T<T_\lambda)$ ではこの項はないため比熱に不連続が生じる。その条件を(54)の l を使って表わすと $l>1$ となることがわかる。3次元自由粒子の場合は $l=1/2$ であり，このときは比熱の不連続はおきず，比熱の微分 $\partial C/\partial T$ が不連続になることが示される。

1-5　物性論における多体問題の典型例

2章以下で，いろいろな方法について応用例をあげながら説明するが，ここであらかじめその応用例について簡単な説明をしておく。これらの詳しい説明については専門書を参照されたい。

a)　金属内の伝導電子

金属の特徴は，各原子の最外殻電子(原子価電子)が，一つの原子に束縛されていず，結晶中を自由に運動できることにある。いいかえると，最外殻電子の属するエネルギー帯は，その一部分だけが電子によって占められ，上の方は空いている。これが **1-3** でも述べたように，電子は互いに独立に運動しているという見方であり，**1体近似**といわれる。

ところで二つの電子の間には静電的な Coulomb 反発力が働いている。

この Coulomb 力は非常に遠い所まで影響を及ぼすため，たとえ二つの電子間の Coulomb 力はそう大きなものでなくても，非常に多数の電子による Coulomb 力を感ずることになり，その影響を無視して，互いに独立に運動していると考えてよいということは，きわめて不思議なことであった。

ここで上に述べたことについてやや詳しい説明をしておく。Coulomb 力のポテンシャルは e^2/r という形で，二つの電子の間の距離に逆比例する。したがって電子が全空間に一様な数密度(単位体積あたりの個数) n_0 で分布しているとき，一つの電子のポテンシャル・エネルギーは平均として

$$\int\frac{e^2}{r}n_0d^3r=n_0\int_0^\infty\frac{e^2}{r}4\pi r^2dr$$

となり，無限大になってしまう。もちろん電子の他に正イオンがほぼ一様に分布しているため，空間は中性に保たれ，このような無限大は実際には現われない。しかし電子が何らかの原因である場所に多く集まって空間電荷ができたとすると，その影響は非常に遠くまで及ぶはずであり，電子の運動はきわめて複雑なものになるはずである。

遮蔽効果とプラズマ振動　上述の疑問に対する解答は言葉でいうと次のようになる。金属内に空間電荷ができると，そのすぐ近くの電子は場所を変えてその空間電荷を打ち消そうとする。このため遠くの電子は空間電荷の存在を感じないままでいるのである〔**遮蔽効果**(screening effect)〕。たとえばある場所に電子が余分に集まると，その場所は負に帯電する。するとその周囲には電子が少なくなった場所ができ，中心の負の電荷を中和しようとする。その結果初め余分にあった電子は周囲から引力を受け，空間電荷はなくなろうとする。このとき電子は運動をするが空間電荷が完全になくなった状態でも電子はまだ速度をもっている。このため電子は運動を続け，初めと逆の空間電荷ができ，それがまたなくなってゆくというように振動がおきる。つまり電子の密度はある振動数で振動することになる。この振動のことを**プラズマ振動**(plasma oscilation)とよび*，その振動数は

$$\omega_{\mathrm{p}}=\sqrt{\frac{4\pi n_0e^2}{m}}\tag{57}$$

で与えられることがわかっている。ただし n_0 は金属中における電子の平均の数密度，m は電子の質量である。(57)の n_0, e, m に実際の数値を代入してみると，毎秒約 10^{16} という大きな値になり，プラズマ振動は非常に速いことがわかる。この振動数より遅い運動に対しては電子は遠くの電荷

* プラズマ振動は金属内だけでなく，放電管のように電離した気体でもおきている。

を感ずることなく，相互作用は近距離だけで働き，電子を互いに独立な粒子と考えることがよい近似になったのである。

電子気体 以上のようなプラズマ振動，電子の遮蔽効果を議論することは多体問題の一つであり，これに対する一つのモデルとして考えられたのが電子気体模型である。これはイオンを粒子として取り扱わず，全空間に一様にならしてしまったものである。つまり一様に分布した正電荷の海の中での電子の運動を議論しようとするものである。この電子気体模型のハミルトニアンは

$$H=\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2m}p_j{}^2+\frac{1}{2}\sum_{i\neq}^{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}-U_0 \tag{58}$$

と書ける。ただし U_0 は一様に分布した正電荷によるポテンシャル・エネルギーである。正確にいうと，U_0 の大きさは無限大なのだが，第二項の電子間の Coulomb エネルギーも同じ無限大を含み，互いに打ち消しあっている。このことをもっとはっきり表わすには，第二項を次のように変形しておけばよい。3次元空間で $1/r$ を Fourier 展開すると

$$\frac{1}{r}=\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{4\pi}{\Omega k^2}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{59}$$

となることを利用して*，第二項を

$$\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{4\pi e^2}{k^2\Omega}\sum_{i\neq}^{N}\sum_{j=1}^{N}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}$$

と書く。この $\boldsymbol{k}$ についての和のうち，$\boldsymbol{k}=0$ の項（これは実は無限大である）は $\boldsymbol{r}_i$, $\boldsymbol{r}_j$ によらず，電子が一様に分布したときのポテンシャル・エネルギーを表わしており，(58) の U_0 と完全に打ち消しあうものである。したがって (58) は

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{N}\Delta_j+\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}\neq 0}\frac{4\pi e^2}{\Omega k^2}\sum_{i\neq}^{N}\sum_{j=1}^{N}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)} \tag{60}$$

---

* この式の数学的に正確な証明はむずかしいが，次のようにすればある程度の納得はゆくであろう。(59) を

$$\frac{1}{r}=\sum_{\boldsymbol{k}}f_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

と書けば

$$f_{\boldsymbol{k}}=\frac{1}{\Omega}\int\frac{1}{r}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\,d^3\boldsymbol{r}$$

で与えられる。この積分はこのままでは収束しないので，これを

$$f_{\boldsymbol{k}}=\lim_{\alpha\to 0}\frac{1}{\Omega}\int\frac{1}{r}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\alpha r}\,d^3\boldsymbol{r}$$

として計算すれば (59) を得る。Ω は系の占める体積である。

となる。ただし $\boldsymbol{p}_j$ を $(\hbar/i)\boldsymbol{\nabla}_j$ でおきかえ*，ラプラシアン演算子

$$\Delta_j=\frac{\partial^2}{\partial x_j{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_j{}^2}+\frac{\partial^2}{\partial z_j{}^2} \tag{61}$$

を用いた。

さて(60)の第一項と第二項の大きさを比べてみよう。それには電子間の平均距離 r_0 を

$$\frac{4\pi}{3}r_0{}^3=\frac{\Omega}{N} \tag{62}$$

で定義し，(60)に現われている量を r_0 を単位として測ることにする。つまり

$$\boldsymbol{r}_j=r_0\boldsymbol{r}_j{}', \qquad \boldsymbol{k}=\frac{1}{r_0}\boldsymbol{k}', \qquad \Delta_j=\frac{1}{r_0{}^2}\Delta_j{}', \qquad \Omega=r_0{}^3\Omega'$$

と書くと，(60)は

$$H=-\frac{\hbar^2}{2mr_0{}^2}\sum_{j=1}^{N}\Delta_j{}'+\frac{1}{2}\frac{4\pi e^2}{r_0}\frac{1}{\Omega'}\sum_{\boldsymbol{k}'\neq 0}\frac{1}{k'^2}\sum_{i\neq}^{N}\sum_{j=1}^{N}e^{i\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}$$

となる。上式を見やすくするため，Bohr(ボーア)半径

$$a_0=\hbar^2/me^2 \tag{63}$$

を使って

$$r_0=r_sa_0 \tag{64}$$

とおけば，

$$H=\frac{e_0^2}{2a_0}\left\{-\frac{1}{r_s{}^2}\sum_{j=1}^{N}\Delta_j{}'+\frac{1}{r_s}\frac{4\pi}{\Omega'}\sum_{\boldsymbol{k}'\neq 0}\frac{1}{k'^2}\sum_{i\neq}^{N}\sum_{j=1}^{N}e^{i\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}\right\} \tag{65}$$

となり，$r_s \ll 1$ のときは第一項が，逆に $r_s \gg 1$ のときは第二項の方が大きいことがわかる。つまり高密度のときは，Pauli 原理によって運動エネルギーの方が大きくなり，低密度のときは逆に Coulomb エネルギーの方が大きくなるのである。低密度のときの取り扱いはむずかしく余り系統的な研究はなされていないが，高密度のときは比較的取り扱いやすく，多くの研究が系統的になされている。そしてこの問題が物性論における多体問題の発生となったのである。このことについては後でやや詳しく述べることにする。

金属内電子についてもう一つ電子とイオンとの相互作用についてつけ加えておく。イオンが各格子点に静止しているときは，イオンによるポテン

* $\boldsymbol{\nabla}_j$ は$(\partial/\partial x_j, \partial/\partial y_j, \partial/\partial z_j)$という微分演算を表わすベクトルでナブラと読む。$\mathrm{grad}_j$ と同じである。

シャルは周期的なため，電子は自由電子とほぼ同じような運動をし，外から電場がかかると加速度運動をする。ところがイオンは熱運動をしているため，電子の感ずるポテンシャルは周期的なものではなくなり，電子の加速を妨げる力が働き，電気抵抗の原因になる。

一つのイオンがつりあいの位置からずれると，まわりのイオンはずれたイオンから力を受け，これもつりあいの位置からずれようとする。このイオンの変位は復元力を受けるから振動をし，この振動は一つのイオンから他のイオンへと結晶中を波となって伝播する。この波は結晶中を伝わる音波に他ならず，これを量子化したものを**フォノン**(phonon)とよぶ。

金属中の音波には横波もあるが，電子と強く相互作用をするのは縦波である。これは縦波は空間電荷をつくるのに対し，横波はつくらないからである。この縦波のフォノンと電子との相互作用は，Coulomb 力によるものであるが，ここで考慮しなければならないのは，電子の遮蔽作用である。フォノンによる空間電荷ができると，そのまわりの電子は適当に位置を変えて，空間電荷の影響を外に出さないようにする。その結果相互作用は短距離だけに働くものになり，比較的取り扱いやすくなる。この電子とフォノンとの相互作用は，ふつうの金属では電気抵抗の原因になるものであり，他方では超伝導をひきおこす原因になるものである。

b）超伝導

超伝導(superconductivity)とは，ある種の金属がある温度 T_c 以下で急に電気抵抗が 0 になる現象で，その本質については非常に長い間，物性物理学者にとって大きな謎とされてきた。1957 年に Bardeen(バーディン)，Cooper(クーパー)，Schrieffer(シュリーファー)の 3 人(BCS と略記する)によって初めていろいろな特徴を巧みに説明しうる電子論が提出され，それ以来目ざましい発展をとげた分野である。超伝導には電気抵抗が 0 というだけでなく，他にも次のような特徴がある。

i）完全反磁性　超伝導体に外から磁場をかけても，磁場の強さがある値 $H_c(T)$ をこさない限り，内部の磁束密度は 0 になっている。これを発見者の名前をとって **Meissner**(マイスナー)**効果**という。

ii）臨界磁場　i)の $H_c(T)$ を臨界磁場とよび，これは温度の関数として，ほぼ

$$H_c(T)=H_0\{1-(T/T_c)^2\} \tag{66}$$

という形をしている。

iii)　相転移　外からの磁場のないとき，T_c では2次の相変化がおきている。つまり潜熱はなく比熱に不連続が生ずる。

以上の他にもいろいろな特徴があるが，ここではふれず，次に i)〜iii) を理解するにはどう考えたらよいかを述べることにする。i) の Meissner 効果により，超伝導体の状態は温度と外からの磁場によって一意的にきまり，超伝導に対する熱力学をつくることができる。その結果 ii) の臨界磁場は i) の Meissner 効果を認めれば，自然に説明できる。

i) の Meissner 効果を表わす現象論的な方程式がかなり前に提出されている。それは超伝導体内の磁束密度 $\boldsymbol{H}(\boldsymbol{r})$ と電流密度 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$ の間に

$$\boldsymbol{H}=-c\,\mathrm{curl}\,\Lambda\boldsymbol{j} \tag{67}$$

という関係を考えたもので，**London**（ロンドン）**方程式**とよばれている。(67) と，Maxwell 方程式

$$\mathrm{curl}\,\boldsymbol{H}=\frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j}+\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t}$$

で $\boldsymbol{E}=0$ とおいたものとを組み合わせると，$\boldsymbol{H}$ は試料の表面から

$$\lambda=\sqrt{\frac{e^2\Lambda}{4\pi}} \tag{68}$$

程度内部に入ると，ほとんど0になることが示される。この λ を，磁場の**侵入距離**(penetration depth) とよぶ。

London 方程式 (67) は，$\boldsymbol{H}=\mathrm{curl}\,\boldsymbol{A}$ とおくと

$$\boldsymbol{j}=-\frac{1}{c\Lambda}\boldsymbol{A} \tag{69}$$

と書けるが，これは電流密度の量子力学的な式

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})=\sum_{j=1}^{N}\int\cdots\int\left\{\frac{e\hbar}{2mi}(\Psi^*\nabla_j\Psi-\Psi\nabla_j\Psi^*)-\frac{e^2}{mc}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_j)\Psi^*\Psi\right\}$$
$$\times\delta(\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}_1\cdots d\boldsymbol{r}_N \tag{70}$$

で，右辺の第一項が0ならば自然に得られるものである。上式の Ψ は磁場がかかっているときの全系の波動関数であるが，これが磁場のないときの波動関数 Ψ_0 と同じならば，Ψ_0 では電流はどこでも0であるから，第一項はたしかに0になる。つまり，系の波動関数が磁場がかかっても形が変わらなければ，(69) の形の電流が得られ，London 方程式が成立し，Meissner 効果を示すことになる。

上のような性質を示すモデルとして考えられたのが，**エネルギー・ギャップモデル**である。これは系の励起状態のエネルギーが，基底状態に連続

につながらず，有限のエネルギーだけ離れているというものである。この場合，小さな摂動が加わった程度では波動関数の形は変化せず，London 方程式が成立する。さらにこのモデルの比熱は低温で急激に小さくなることが期待されるが，これは実際の超伝導体の比熱が，常伝導状態に比べるとずっと小さくなっている事実に合っている。このエネルギー・ギャップモデルを電子論的に導出したのが BCS 理論で，きわめて巧く実験事実を説明している。たとえば T_c における相転移は，エネルギー・ギャップが温度が上がるにつれて減少し，T_c で 0 になるとして説明できる。超伝導現象は次に述べる液体ヘリウムの超流動現象とともに，巨視的なスケールでおきている量子現象と理解され，物性論における非常に興味深い一分野になっている。

c) 液体ヘリウム

ヘリウムは質量が小さく，原子間の相互作用が小さいため，量子効果が大きく，0 K でも圧力をかけなければ液体のままでいる唯一の物質である。しかも約 2 K 以下になるときわめて特異な現象を示し，そのいろいろな特徴は液体が二つの部分から成るものと考えるとうまく説明できる（**2 流体モデル**）。二つの部分のうち，一方はいろいろな性質がふつうの流体と全く同じで**常流体**(normal fluid)とよばれるが，他はふつうの流体とは全く異なり粘性なしに流れることができ，またエントロピーを運ばず，**超流体**(superfluid)とよばれる。二つの流体の密度 ρ_n，ρ_s はそれぞれ温度の関数としてきまっており，ある温度 T_λ で $\rho_s=0$ になる。この温度（λ 温度または λ 点とよぶ）T_λ は約 2 K で，ここでは比熱が異常性を示す。

ところでヘリウムには同位体として He^3 があるが，これの液体は上のような現象は少なくとも 0.01 K までは示さない*。He^3 とふつうの He^4 との差は，原子核の質量と，**1-3** に述べたように Fermi 粒子と Bose 粒子の違いである。したがって T_λ における相転移は Bose 凝縮と考えてよさそうである。しかし相互作用のある Bose 粒子の凝縮についてはまだ満足すべき理論はない。

一方液体 He^4 の低温（0 K 付近）の性質は，系の励起状態のエネルギーが

$$E=E_0+\sum_{p}\epsilon(\boldsymbol{p})n(\boldsymbol{p}), \qquad n(\boldsymbol{p})=0,\ 1,\ 2,\ \cdots \tag{71}$$

---

* 最近，液体 He^3 でも，約 30 気圧程度の圧力下では，0.002 K 付近で超流動らしい相転移を示す実験がいくつか報告され始めている。これは **b)** の超伝導と同じ性質のものと考えられている。

という形に書け*，$\epsilon(\boldsymbol{p})$ としては

$$\epsilon(\boldsymbol{p}) \sim vp \qquad (p\ 小) \tag{72 a}$$

$$\sim \frac{1}{2\mu}(p-p_0)^2 \qquad (p\ 大) \tag{72 b}$$

という形のものと考えると，きわめてうまく説明できる。このことは Landau (ランダウ) によって初めて提唱されたもので，(71)の形は，系がエネルギー $\epsilon(\boldsymbol{p})$ をもった粒子からなるものと考えられることを示している。そしてこの粒子には (72 a, b) の二種類があることになり，(72 a)のようなエネルギーをもった粒子を**フォノン**，(72 b) に対応する粒子を**ロトン** (roton) とよんでいる。これは，(72 a)の v が，液体中を伝わる音波の伝播速度に等しく，(72 a) は音波を量子化した粒子のエネルギーに他ならず，このためこの粒子をフォノンとよび，(72 b) の方は，流体の渦運動に対応するものと考えられ，ロトンとよばれたのである。そこで問題は，このフォノン，ロトンの形のエネルギー・スペクトルを原子論的に導出することで，そのためのいろいろな試みがなされている。

d) Heisenberg モデル

たとえば鉄のように永久磁石になる物質を強磁性体というが，この強磁性体の一つのモデルに **Heisenberg** (ハイゼンベルク) **モデル**がある。このモデルは，磁性の原因は個々の原子のスピンにあり，それが結晶中で平行に並ぶと強磁性を生ずると考えるものである。一つの原子が不完全殻 (通常は d または f 軌道の一部分に電子が入っているもの) があると，この不完全殻中の電子は，そのスピン，軌道角運動量とも互いに平行になろうとし〔**Hund** (フント) **の法則**〕，原子全体として角運動量，したがって磁気モーメントをもつようになる。この原子の角運動量を簡単にスピンとよび，$\hbar\boldsymbol{S}$ と表わすことにする。また磁気モーメントを $g\mu_B\boldsymbol{S}$ であるとする〔$\mu_B = e\hbar/2mc$ は **Bohr 磁子**，g は **Landé** (ランデ) **の因子**とよばれるもので，軌道角運動量がないときは $g=2$ である〕。

スピン $\boldsymbol{S}$ をもった原子が結晶中にあって，次のような相互作用をしていると考えるのが Heisenberg モデルである。

$$H = -2J\sum_{(i,j)} \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j \tag{73}$$

ただし和は隣あった原子間についてとるものとする。(73)の $\boldsymbol{S}_i$ は，i 番目

---

* E_0 は基底状態のエネルギーである。

の原子のスピンを表わす演算子で，違う原子の $\boldsymbol{S}$ は可換であるが，同じ原子のスピンの各成分は可換ではない。これを式で示すと

$$[S_i^x,\ S_i^y]=iS_i^z\delta_{ij},\qquad [S_i^y,\ S_j^z]=iS_i^x\delta_{ij},\qquad [S_i^z,\ S_j^x]=iS_i^y\delta_{ij}\tag{74}$$

で表わされる。(73)から $J>0$ のときは $\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j$ が大きい方が系のエネルギーが低いことがわかる。つまり低温では各スピンが平行になった状態が実現され，これが強磁性状態〔外からの磁場がなくても磁化している状態(これを**自発磁化**という)〕である。

ハミルトニアン(73)を用いて議論すべき主な問題は次の二つである。一つはある温度以上では自発磁化は示さないような温度 T_c〔**Curie**（キュリー）**温度**〕が存在し，T_c では2次の相転移を示すことである。この2次の相転移を正確に議論することは非常にむずかしい問題で，まだ解かれていない。場合によってはスピンが可換でないことが余分なわずらわしさを生ずるので，(73)で $\boldsymbol{S}_i$ の z 成分 S_i^z のみをとったモデル，つまり

$$H=-2J\sum_{(i,j)}S_i^z\cdot S_j^z\tag{75}$$

が相転移を議論するのに使われる。これを **Ising**（イジング）**モデル**とよぶ。この Ising モデルに対してすら，2次相転移の性質を正確に調べることは3次元結晶ではまだ不可能で，そのためいろいろな近似法が考案されている。

(73)のハミルトニアンのもう一つの問題は，低温における性質である。これを調べるにはスピン演算子の性質を知っておく必要があるので，次に簡単に説明しておく。

スピン演算子の性質　前にも述べたように，異なる原子のスピン演算子は可換なので，一つの原子のスピン演算子のみを考えればよく，それを $\boldsymbol{S}=(S^x,S^y,S^z)$ と書く。$S^\alpha(\alpha=x,y,z)$ の交換関係は(74)で与えられているが，スピンの大きさとして

$$\boldsymbol{S}^2=(S^x)^2+(S^y)^2+(S^z)^2\tag{76}$$

をつくると，$\boldsymbol{S}^2$ は S^α のいずれとも可換なことがわかる。そこで $\boldsymbol{S}^2$ と S^α の一つ，たとえば S^z の両方を対角化する表示をとることにし，それぞれの固有値を A, M と書き，対応する規格化された固有関数を $|M,S\rangle$ と書くことにする。つまり

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}^2|M,A\rangle&=A|M,A\rangle\\ S^z|M,A\rangle&=M|M,A\rangle\end{aligned}\tag{77}$$

ここで S^x, S^y のかわりに

$$S^+=S^x+iS^y,\qquad S^-=S^x-iS^y\tag{78}$$

という演算子を使うことにすると，その交換関係は

$$[S^+,\ S^z]=-S^+,\qquad [S^-,\ S^z]=S^-,\qquad [S^+,\ S^-]=2S^z\tag{79}$$

であることがすぐわかる。S^+, S^- は $\boldsymbol{S}^2$ とは可換であるから，その行列要素は A に

ついては対角化されており，M については非対角的であるが，(79)から0でない行列要素は，$\langle M+1, A|S^+|M, A\rangle$，$\langle M, A|S^-|M-1, A\rangle$ だけであることがすぐにわかる。以下では $A=$一定 の空間に話を限り*，固有関数も単に $|M\rangle$ と書くことにする。

(79)の交換関係より

$$S^z(S^+|M\rangle)=(M+1)S^+|M\rangle$$
$$S^z(S^-|M\rangle)=(M-1)S^-|M\rangle$$

が得られるから，$S^{\pm}|M\rangle$ は固有値 $M\pm1$ の S^z の固有関数になっていることがわかる。つまり $S^{\pm}|M\rangle$ が0でないかぎり

$$\begin{cases} S^+|M\rangle=a_M|M+1\rangle \\ S^-|M\rangle=b_M|M-1\rangle \end{cases} \tag{80}$$

と書けることになる。ところで

$$\boldsymbol{S}^2-(S^z)^2=(S^x)^2+(S^y)^2=S^+S^--S^z \tag{81}$$

と書けるから，両辺の対角要素をつくり，

$$\langle M|S^+S^-|M\rangle=|\langle M-1|S^-|M\rangle|^2=|\langle M|S^+|M-1\rangle|^2=|b_M|^2=|a_{M-1}|^2$$

であることを使えば

$$\begin{aligned} |a_M|^2&=A-M(M+1) \\ |b_M|^2&=A-M(M-1) \end{aligned} \tag{82}$$

が得られる。これらは負にならないから，M には上限と下限が存在するが，その上限の M に対しては(80)の a_M が0でなければならない**。また下限の M に対しては b_M が0でなければならない。したがって M の上限を M_1，下限を M_2 とすると

$$A=M_1(M_1+1)=M_2(M_2-1)$$

でなければならない。これの $M_1\geq M_2$ の解は

$$M_1=-M_2$$

であり，これを S と書くと

$$A=S(S+1) \qquad (-S\leq M\leq S) \tag{83}$$

ということになる***。さらに M の値は1ずつ違っているから，M の上限と下限の間隔 $2S$ は整数でなければならず，これからスピンの大きさは整数または半整数でなければならないことになる。また(82)より固有関数の位相を適当に選べば

$$a_M=\sqrt{S(S+1)-M(M+1)}$$
$$b_M=\sqrt{S(S+1)-M(M-1)}$$

にとることができる。

以上をまとめると次のようになる。$\boldsymbol{S}^2$ と S^z を同時に対角化する固有関数系をとれば，

---

* A の大きさは原子の不完全殻に入っている電子の数できまってしまう。軌道角運動量が関与しているときは，話はもっと複雑であるが，いずれにせよ原子の状態で A はきまっている。いいかえると A の違う値をもった状態は，エネルギーがきわめて高く，考える必要はない。

** もし上限の M_1 に対して $a_{M_1}\neq0$ とすると(80)により $|M_1+1\rangle$ が存在し，これに対しては(82)が負になってしまう。

*** この S をスピンの大きさとよぶ。

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{S}^2|M\rangle = S(S+1)|M\rangle \\
&S^z\,|M\rangle = M|M\rangle \\
&S^+|M\rangle = \sqrt{S(S+1)-M(M+1)}\;|M+1\rangle \\
&S^-|M\rangle = \sqrt{S(S+1)-M(M-1)}\;|M-1\rangle
\end{aligned}
\tag{84}
$$

となり，S は 1/2, 1, 3/2, $\cdots$ という整数または半整数を，M は $-S$, $-S+1, \cdots$, $S-1$, S という $(2S+1)$ 個の値をとる。

強磁性体における基底状態　前にも述べたように，ハミルトニアン(75)で $J>0$ のときは，基底状態はすべてのスピンが平行になった状態であることは明らかである。すべてのスピンが平行ということは，波動関数でいうと次のことを意味する。いま全スピンの和

$$\boldsymbol{S}_{\mathrm{tot}} = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{S}_i \tag{85}$$

をつくると，ハミルトニアン(75)は

$$\boldsymbol{S}_{\mathrm{tot}}^2 = \left(\sum_{i=1}^{N} S_i^x\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{N} S_i^y\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{N} S_i^z\right)^2$$

と可換であることは容易に確かめられる。ところで $\boldsymbol{S}_{\mathrm{tot}}^2$ の固有値を $S_{\mathrm{tot}}(S_{\mathrm{tot}}+1)$ と書くと，

$$0 \leq S_{\mathrm{tot}} \leq NS$$

であることが証明できるが*，すべてのスピンが平行ということは，S_{tot} が最大値の NS になった状態にあることを意味する。この $S_{\mathrm{tot}}=NS$ という状態の中で，$S_{\mathrm{tot}}^z=NS$ という状態は，すべてのスピンに対して $S_i^z=S$ になっている状態で，式で書くと

$$|0\rangle = \prod_i |S\rangle_i \tag{86}$$

である。ただし $|S\rangle_i$ は i 番目のスピンの $S_i^z=S$ の波動関数である。この状態 $|0\rangle$ に対しては

$$S_i^z|0\rangle = S|0\rangle, \qquad S_i^+|0\rangle = 0 \tag{87}$$

であることは明らかである。(87)から $|0\rangle$ は S_{tot}^z の固有関数で，固有値は NS であることがわかるが，$\boldsymbol{S}_{\mathrm{tot}}^2$ の固有関数でその固有値が $NS(NS+1)$ になっていることが次のようにして示される。まず

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{S}_{\mathrm{tot}}^2 &= \sum_i \{(S_i^x)^2+(S_i^y)^2+(S_i^z)^2\} + \sum_{i\neq j}\sum (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z) \\
&= \sum_i S(S+1) + \sum_{i\neq j}\sum \left\{S_i^z S_i^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)\right\}
\end{aligned}
$$

---

*　この証明はかなり長くなるので，ここでは省略する。

と書けば，(87)を使って

$$\boldsymbol{S}_{\mathrm{tot}}{}^2|0\rangle = NS(S+1)|0\rangle + N(N-1)S^2|0\rangle = NS(NS+1)|0\rangle$$

が得られる。もっと一般的に

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j|0\rangle &= \left\{S_i{}^z S_j{}^z + \frac{1}{2}(S_i{}^+S_j{}^- + S_i{}^-S_j{}^+)\right\}|0\rangle \\ &= S^2|0\rangle\end{aligned}$$

であるから，$|0\rangle$ は(73)のハミルトニアンの固有関数であることがわかる。つまり

$$H|0\rangle = -2JS^2\frac{Nz}{2}|0\rangle = E_0|0\rangle$$

$$E_0 = -NJzS^2 \tag{88}$$

(z は一つの格子点のまわりにある最近接格子点の数)

励起状態，スピン波(マグノン) (86)の $|0\rangle$ につながる状態から，H の固有関数を次のようにつくることができる。まず

$$|i\rangle = (2S)^{-1/2}S_i{}^-|0\rangle = |S-1\rangle_i \prod_{j\neq i}|S\rangle_j \tag{89}$$

をつくると，これは規格化され互いに直交している。つまり

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$$

この $|i\rangle$ を使ってハミルトニアンの固有関数をつくるには，まず

$$H|i\rangle = (E_0 + 2JzS)|i\rangle - 2JS\sum_{\langle j\rangle_i}|j\rangle \tag{90}$$

であることに注意する。ただし2番目の和の $\langle j\rangle_i$ は，i の隣の格子点 j についての和をとることを意味する。ここで

$$|\boldsymbol{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_j}|j\rangle \tag{91}$$

をつくると，これが H の固有関数になり，そのエネルギー $E_{\boldsymbol{k}}$ は

$$\left.\begin{aligned}E_{\boldsymbol{k}} &= E_0 + \epsilon_{\boldsymbol{k}} \\ \epsilon_{\boldsymbol{k}} &= 2JzS\{1-\gamma(\boldsymbol{k})\}\end{aligned}\right. \tag{92}$$

となることがわかる。ただし

$$\gamma(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{z}\sum_{\boldsymbol{\rho}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\rho}} \tag{93}$$

$\boldsymbol{\rho}$ は隣の格子点へのベクトルである。

(91)の $|\boldsymbol{k}\rangle$ は，ある場所のスピンが少し傾いた状態 ($|j\rangle$) が，波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ で結晶中を伝播してゆく波を表わし，これを**スピン波**(spin wave)という。とくに $\boldsymbol{k}=0$ の状態

$$|\boldsymbol{k}=0\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j|j\rangle \tag{94}$$

は，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}_{\mathrm{tot}}{}^2|\boldsymbol{k}=0\rangle&=NS(NS+1)|\boldsymbol{k}=0\rangle\\ \boldsymbol{S}_{\mathrm{tot}}{}^z|\boldsymbol{k}=0\rangle&=(NS-1)|\boldsymbol{k}=0\rangle\end{aligned} \tag{95}$$

を満たし，これは全スピンの大きさが NS で，その z 成分が $NS-1$ である状態になっている。元来のハミルトニアンは，x, y, z 方向に対し同等なので(等方的)，エネルギーはスピンの z 成分によって変わらないはずであるが，(93)より

$$\gamma(0)=1$$

であるから，たしかに $\epsilon_{\boldsymbol{k}=0}=0$，つまり $E_{\boldsymbol{k}=0}=E_0$ で，$|0\rangle$ と同じエネルギーをもっている。

さらに全スピンの大きさが NS で，z 成分が $NS-2$ であるような状態は，2個所のスピンを傾けて，その場所を結晶中を一様に動かすことによって得られ，そのエネルギーは基底状態と同じである。しかしある波数をもっている状態，つまりスピン波が2個励起された状態のエネルギーは，正確に求めることができない。さらに有限温度になると，スピン波が数多く励起されるので，スピン波間の相互作用が重要になり，その取り扱いが問題になる。

反強磁性 以上は $J>0$ の場合であるが，$J<0$ の場合はもっと面倒である。それは(86)の状態はもはや基底状態ではなく*，基底状態はむしろ次のようになっているものと考えられるからである。格子点を二種類の部分格子に分け，一方の最近接格子点は必ず他の部分格子に属するようにする。そして一方の格子点のスピンに対しては $S^z=S$ を，他方の部分格子では $S^z=-S$ になるような状態をとる。このときのエネルギーは，Ising モデルでは $NJzS^2$ となり，$J<0$ のときは(88)に比べてずっと低い。しかし Heisenberg モデルでは，この状態はハミルトニアンの固有関数ではなく，基底状態は正確に求めることができず，いろいろな近似が必要になる。こういう物質を反強磁性体(antiferromagnet)という。

---

* このことは(92)の $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ が負になることからもわかる。

演習問題 1.

1. $\mathrm{Tr}\,A=\sum_n A_{nn}$ について $\mathrm{Tr}\,[AB]=\mathrm{Tr}\,[BA]$ が成り立つことを示し，さらに $A'=UAU^{-1}$ とすると $\mathrm{Tr}\,A'=\mathrm{Tr}\,A$ となることを示せ。($U^{-1}=U^*$ のとき，この変換をユニタリー変換という。)

2. (14)式を用いて，(15)式を証明せよ。

3. (26)式を用いて，(25)式を証明せよ。

4. (28)式を用いて，(29)式を証明せよ。

5. 自由粒子系では，1粒子のエネルギーは

$$\epsilon(\boldsymbol{k})=\frac{\hbar^2}{2m}k^2$$

で与えられる。波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ の各成分は $(2\pi/L)$ の整数倍であるとして，1粒子の状態密度 $\rho(\epsilon)$ を計算せよ。

6. $\rho(\epsilon)\propto\epsilon^l$ で $l>0$ ならば Bose 凝縮がおきることを証明せよ。さらに2次元の自由粒子では，Bose 凝縮はおきないことを示せ。

7. エネルギーが運動量の関数として

$$\epsilon(\boldsymbol{p})=\Delta+\frac{1}{2m}p^2 \qquad (p\neq 0)$$

$$\epsilon(\boldsymbol{p}=0)=0$$

であるような3次元 Bose 粒子の内部エネルギー，比熱を低温で求めよ。

8. スピンの交換関係(74)式を用いて，$\underline{S}^2$ と $S^\alpha\,(\alpha=x,y,z)$ は可換であることを示せ。

9. (90)式を対角化する波動関数は(91)式で，そのエネルギーは(92)式で与えられることを示せ。

10. (95)式を証明せよ。

2. 第二量子化

2-1 数表示

1-3 で述べたように，多系体の波動関数を行列式またはパーマネントを使って展開することが多い。しかし，行列式やパーマネントを(1·30)* や(1·31)の形のままで使って，いろいろな量の行列要素を計算することはわずらわしくもあり，余り便利ではないので，別な表現法を考える。

(1·30), (1·31)は粒子が占めている軌道 $k_1, \cdots, k_N$ を使って指定されているが，逆に軌道 k に入っている粒子の数 n_k を，すべての軌道について指定することによって表わすこともできる(数表示)。たとえば3個の粒子が2番目，3番目，5番目の軌道に入っている状態は，**1-3** の方法では(2, 3, 5)と表わされるが，数表示では $n_1=0$, $n_2=1$, $n_3=1$, $n_4=0$, $n_5=1$, $n_6=0, \cdots$ であるから，(0, 1, 1, 0, 1, 0, ⋯) と表わされる。もちろん全粒子数 N は

$$N=\sum_k n_k$$

で表わされ，Fermi 粒子ではすべての n_k は0または1という値だけをとる。Bose 粒子では n_k は 0, 1, 2, ⋯ という任意の負でない整数値をとる。この数表示を使えば，独立粒子の大きな状態和が容易に計算できることは，**1-4** で述べた通りである。Fermi 粒子で一つ注意すべきことは，(1·30)の行列式を $\Phi_{(k_1\cdots k_N)}$ と書くことにすると，

$$\Phi_{(k_1k_2\cdots k_N)}=-\Phi_{(k_2k_1\cdots k_N)}$$

であることである**。したがって数表示をするときは，$k_1\cdots k_N$ の並べ方の基準をあらかじめ決めておかねばならない。そこで軌道に適当な番号づ

* 1章の(30)式を(1·30)と書いて引用することにする。

** これは行列式の二つの列を入れかえたことに対応している。

けをして，$k_1<k_2<\cdots<k_N$ という順番にしたとき，$\Phi_{(k_1\cdots k_N)}$ を $\Phi_{\{n_k\}}$ と書くことにしておく。Bose 粒子ではこのようなことは必要としない。

以下では行列式またはパーマネントを表わすのに別な空間を使い，いろいろな物理量をこの空間で表わすことについて述べる。それには Fermi 粒子と Bose 粒子を別々に説明した方がよいので，節を改めて述べる。

2-2 Fermi 粒子系

まず次の性質を満たす演算子 a_k, $a_k{}^\dagger$ を各軌道に対して考える。

$$\left.\begin{aligned}\{a_k,\ a_{k'}{}^\dagger\}&\equiv a_k a_{k'}{}^\dagger+a_{k'}{}^\dagger a_k=\delta_{kk'}\\ \{a_k,\ a_{k'}\}&\equiv a_k a_{k'}+a_{k'}a_k=0\\ \{a_k{}^\dagger,\ a_{k'}{}^\dagger\}&\equiv a_k{}^\dagger a_{k'}{}^\dagger+a_{k'}{}^\dagger a_k{}^\dagger=0\end{aligned}\right\} \tag{1}$$

ただし a_k と $a_k{}^\dagger$ は互いに Hermite 共役な演算子である。(1)の $\{A, B\}\equiv AB+BA$ は対称積または anticommutator といわれるもので，とくに $\{A,\ B\}=0$ を満たす二つの演算子は反可換(anticommute)という。

さてある k に対して

$$n_k=a_k{}^\dagger a_k \tag{2}$$

の固有値について考える。一つの固有値を n_0，その固有関数を φ とする。すなわち

$$n_k\varphi=n_0\varphi$$

とする。すると $a_k\varphi$ も n_k の固有関数で，その固有値は $1-n_0$ であることが，(1)を使った次の式からわかるであろう。

$$\begin{aligned}n_k(a_k\varphi)&=a_k{}^\dagger a_k a_k\varphi=(1-a_k a_k{}^\dagger)a_k\varphi\\ &=a_k\varphi-a_k n_k\varphi=(1-n_0)a_k\varphi\end{aligned}$$

一方(1)より $a_k{}^2=0$ だから，実は $n_k(a_k\varphi)=0$ であることがわかる。したがって $n_0=1$ のときは $a_k\varphi$ は固有値 0 の固有関数であり，$n_0\neq1$ のときは $a_k\varphi=0$ ということになる。同様にして $a_k{}^\dagger\varphi$ について調べれば，$n_0=0$ のときは $a_k{}^\dagger\varphi$ は固有値 1 の固有関数であり，$n_0\neq0$ のときは $a_k{}^\dagger\varphi=0$ であることが示される。

こうして n_k の固有値 n_0 は 0 または 1 に限られ，$n_0=0$ の固有関数を φ_0 と書くと，$a_k\varphi_0=0$ で $a_k{}^\dagger\varphi_0$ が固有値 1 の固有関数になっていることがわかった。そしてこの二つの関数のつくる空間で，a_k と $a_k{}^\dagger$ は

$$a_k=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix},\qquad a_k{}^\dagger=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix} \tag{3}$$

という行列で与えられる。

(2)の n_k は **2–1** で述べたように軌道 k を占める粒子数を表わし，a_k はこれに入っている粒子数を1個減らす演算子，$a_k{}^\dagger$ は粒子数を1個増加させる演算子であることがわかる。この a_k を**消滅演算子**(annihilation operator)，$a_k{}^\dagger$ を**生成演算子**(creation operator)とよぶ。

以上の議論をすべての軌道について行ない，すべての k に対して n_k の固有値が0である状態を $|0\rangle$ と書くことにする。この $|0\rangle$ はどの軌道にも粒子が入っていないので，**真空状態**とよぶことがある。つまり

$$a_k|0\rangle=0 \tag{4}$$

ここで

$$\Phi(k_1,\cdots,k_N)=a_{k_1}{}^\dagger\cdots a_{k_N}{}^\dagger|0\rangle \tag{5}$$

という関数をつくると，これが行列式と同じ性質をもっていることがわかる。たとえば

$$\Phi(k_1,k_2,\cdots,k_N)=-\Phi(k_2,k_1,\cdots,k_N)$$

であることは，(1)より $a_{k_1}{}^\dagger a_{k_2}{}^\dagger=-a_{k_2}{}^\dagger a_{k_1}{}^\dagger$ であることからわかるし，また

$$(\Phi(k_1',\cdots,k_N'),\ \Phi(k_1,\cdots,k_N))=\det|\delta_{k_i'k_j}| \tag{6}$$

であることは* 次のようにしてわかる。右辺はその (i,j) 要素が $\delta_{k_i'k_j}$ であるような行列式である。(6)の左辺は

$$\langle 0|a_{k_N'}\cdots a_{k_1'}a_{k_1}{}^\dagger\cdots a_{k_N}{}^\dagger|0\rangle$$

であるが，たとえば k_1' が $k_1,\cdots,k_N$ のどれとも等しくなければ

$$a_{k_1'}a_{k_1}{}^\dagger\cdots a_{k_N}{}^\dagger|0\rangle=(-1)^N a_{k_1}{}^\dagger\cdots a_{k_N}{}^\dagger a_{k_1'}|0\rangle=0$$

になってしまう。k_1' がたとえば k_j と等しければ

$$a_{k_1'}a_{k_1}{}^\dagger\cdots a_{k_N}{}^\dagger|0\rangle=(-1)^{j-1}a_{k_1}{}^\dagger\cdots a_{k_{j-1}}{}^\dagger a_{k_{j+1}}{}^\dagger\cdots a_{k_N}{}^\dagger|0\rangle$$

となり，以下 $k_2',\cdots,k_N'$ について同様な議論を行なって，(6)を証明することができる。こうして波動関数 (5) は行列式(1·30)と全く同じ性質をもっていることがわかる。

次に任意の演算子 $F(x_1,\cdots,x_N)$ に対応する演算子 $\hat{F}$ を $a_k{}^\dagger, a_k$ で表わさねばならない。つまり F の行列式(1·30)についての行列要素が，(5)についての行列要素と一致するような $\hat{F}$ をつくらねばならない。まず簡単のため

$$F(x_1,\cdots,x_N)=\sum_{j=1}^{N}f(x_j) \tag{7}$$

---

* $k_1<\cdots<k_N$, $k_1'<\cdots<k_N'$ としておくときは，(6)の右辺は $\prod_{i=1}^{N}\delta_{k_ik_i'}$ に等しい。

という形の場合を考える。(1·30)の $\Phi_{(k_1\cdots k_N)}(x_1, \cdots, x_N)$ を $|k_1\cdots k_N)$ と書くと

$$(k_1'\cdots k_N'|F|k_1\cdots k_N)=\sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N}(k_i'|f|k_j)\Delta_{ij} \tag{8}$$

となることは容易に確かめられる。ただし Δ_{ij} は(6)の右辺の行列式の (i, j) 要素についての余因数で

$$\det|\delta_{k_l k_m'}|=\sum_{i=1}^{N}\delta_{k_i k_j'}\Delta_{ij}$$

で定義される。また $(k_i|f|k_j')$ は(7)の $f(x)$ の行列要素で

$$(k_i'|f|k_j)=\int dx\varphi_{k_i'}{}^*(x)f(x)\varphi_{k_j}(x)$$

である。ただし座標についての積分とスピン変数についての和をまとめて $\int dx$ と書いた。(8)は別の表わし方ができる。

$$F|k_1\cdots k_N)=\sum_{j=1}^{N}\sum_{k}f_{kk_j}|k_1\cdots k_{j-1}k\,k_{j+1}\cdots k_N) \tag{9}$$

これは $(k_1'\cdots k_N'|F|k_1\cdots k_N)$ をつくってみれば，(8)の右辺が得られることから容易にわかる。ここで

$$\hat{F}=\sum_{k}\sum_{k'}f_{kk'}a_k{}^{\dagger}a_{k'} \tag{10}$$

を定義すると，(5)に演算して

$$\hat{F}\Phi(k_1, \cdots, k_N)=\sum_{j=1}^{N}\sum_{k}f_{kk_j}\Phi(k_1, \cdots, k_{j-1}, k, k_{j+1}, \cdots, k_N)$$

となり，(9)と同じ形になる。したがって F と(1·30)の行列式を使うことは，$\hat{F}$ と(5)を使うことと全く同等である。

同じ議論により

$$F_2(x_1, \cdots, x_N)=\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}^{N}\sum^{N}f_2(x_i, x_j) \tag{11}$$

という形のときは

$$\hat{F}_2=\frac{1}{2}\sum_{k_1}\sum_{k_2}\sum_{k_1'}\sum_{k_2'}(k_1k_2|f_2|k_1'k_2')a_{k_1}{}^{\dagger}a_{k_2}{}^{\dagger}a_{k_2'}a_{k_1'} \tag{12}$$

という演算子を使えばよいことがわかる。x 表示の空間でのハミルトニアンが

$$H=\sum_{j=1}^{N}h(x_j)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j=1}^{N}\sum^{N}v(x_i, x_j) \tag{13}$$

という形のときは，$a_k{}^{\dagger}, a_k$ を使うと

$$H=\sum_k\sum_{k'}(k|h|k')a_k{}^\dagger a_{k'}+\frac{1}{2}\sum_{k_1k_2k_1'k_2'}\cdots\sum(k_1k_2|v|k_1'k_2')a_{k_1}{}^\dagger a_{k_2}{}^\dagger a_{k_2'}a_{k_1'} \tag{14}$$

で表わされ，これを使って系の性質を議論すればよいことになる。

この $a_k{}^\dagger$, a_k を使った表示では，粒子の総数 N は一定である必要はなく，いろいろな N の空間を自動的に含んでおり，とくに大きな状態和を計算するのに便利である。

2-3　Bose 粒子系

この場合は次の性質をもった演算子を考える。

$$\begin{aligned}&[a_k,\ a_{k'}{}^\dagger]\equiv a_ka_{k'}{}^\dagger-a_{k'}{}^\dagger a_k=\delta_{kk'}\\&[a_k,\ a_{k'}]=[a_k{}^\dagger,\ a_{k'}{}^\dagger]=0\end{aligned} \tag{15}$$

a_k と $a_k{}^\dagger$ は互いに Hermite 共役な演算子である。前と同じように

$$n_k=a_k{}^\dagger a_k$$

の一つの固有値を n_0，そのときの固有関数を φ とすると，$a_k\varphi$, $a_k{}^\dagger\varphi$ も固有関数で，その固有値はそれぞれ n_0-1, n_0+1 であることが次の式からわかる。

$$\begin{aligned}n_k(a_k\varphi)&=a_k{}^\dagger a_ka_k\varphi=(a_ka_k{}^\dagger-1)a_k\varphi\\&=a_kn_k\varphi-a_k\varphi=(n_0-1)a_k\varphi\\n_k(a_k{}^\dagger\varphi)&=a_k{}^\dagger a_ka_k{}^\dagger\varphi=a_k{}^\dagger(a_k{}^\dagger a_k+1)\varphi\\&=(n_0+1)a_k{}^\dagger\varphi\end{aligned}$$

ところで $n_0=(\varphi,\ n_k\varphi)$ であるが，これは

$$n_0=(\varphi,\ a_k{}^\dagger a_k\varphi)=(a_k\varphi,\ a_k\varphi)$$

であるから，$n_0\geqq 0$ でなければならない。つまり n_k の固有値は負になりえない。ところが上に示したように，n_0 が n_k の固有値ならば n_0-1 も固有値であり，したがって n_0-2, n_0-3, $\cdots$ も固有値のはずである。これらが負にならないためには n_0 は0または正の整数で，とくに $n_0=0$ の固有関数 φ_0 は $a_k\varphi_0=0$ でなければならない。

こうして n_k の固有値は 0, 1, 2, $\cdots$, n, $\cdots$ で，対応する固有関数は

$$|0\rangle\equiv\varphi_0,\ |1\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{1!}}a_k{}^\dagger\varphi_0,\ |2\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{2!}}(a_k{}^\dagger)^2\varphi_0,\ \cdots,\ |n\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{n!}}(a_k{}^\dagger)^n\varphi_0,\ \cdots \tag{16}$$

である。これらの関数が規格化されていることは(15)の交換関係を使えば

確かめることができる。(16) の関数系を使って a_k, $a_k^\dagger$ の行列要素を計算すると，

$$a_k|n\rangle=\sqrt{n}\,|n-1\rangle,\qquad a_k^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \tag{17}$$

となり，したがって a_k, $a_k^\dagger$ の行列は

$$a_k=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ & \cdots\cdots & & \cdots \end{pmatrix},\qquad a_k^\dagger=\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ & & \cdots\cdots & & \cdots \end{pmatrix} \tag{18}$$

となる。

前と同じように，以上の議論をすべての k に対して行ない，

$$a_k|0\rangle=0$$

になる真空 $|0\rangle$ を定義し，パーマネントに対応して

$$\Phi(k_1,\cdots,k_N)=\frac{1}{\sqrt{\prod_k n_k!}}a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger\cdots a_{k_N}^\dagger|0\rangle \tag{19}$$

を定義する。これは数表示では次のようにも書ける。

$$\Phi(\{n_k\})=\prod_k\frac{1}{\sqrt{n_k!}}(a_k^\dagger)^{n_k}|0\rangle \tag{20}$$

演算子 F に対して，a_k, $a_k^\dagger$ を使った空間での演算子 $\hat{F}$ のつくり方は Fermi 粒子の場合と全く同じで，ハミルトニアンも (14) と同じ形になる。ただ $a_k, a_k^\dagger$ の交換関係が (1) と (15) のように異なるだけである。

2-4 第 二 量 子 化

ハミルトニアン (14) を違う形に書くことを考える。a_k を使って

$$\psi(x)=\sum_k a_k\varphi_k(x) \tag{21}$$

を定義すると，(14) は

$$H=\int\psi^\dagger(x)h(x)\psi(x)dx+\frac{1}{2}\iint\psi^\dagger(x)\psi^\dagger(x')v(x,x')\psi(x')\psi(x)dxdx' \tag{22}$$

と書けることは明らかである。(21) の波動関数は，a_k がふつうの数ならば，ふつうの意味での 1 粒子の波動関数に他ならないが，今の場合は a_k が演算子なので，

$$\left.\begin{aligned}\psi(x)\psi^\dagger(x')\pm\psi^\dagger(x')\psi(x)&=\delta(x-x')\\ \psi(x)\psi(x')\pm\psi(x')\psi(x)&=0\\ \psi^\dagger(x)\psi^\dagger(x')\pm\psi^\dagger(x')\psi^\dagger(x)&=0\end{aligned}\right\}\tag{23}$$

という交換関係を満たす演算子である。ただし＋は Fermi，－は Bose 粒子の場合である。この意味で $\psi(x)$ を量子化された波動関数とよび，この方法を**第二量子化**という。ハミルトニアン(22)，したがって(14)は第二量子化されたハミルトニアンである。この形式は，元来 $\psi(x)$ という場があったとき，これを量子化したときに得られるもので，場の量子論ではおなじみのものである。こうして多体系の運動を議論するのに，場の量子論で使われたいろいろな方法を使うことができる。

最後に $\psi(x)$ を物理量と考えたとき，その時間変化は Heisenberg の運動方程式から求めることができ，

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}&=-[H,\ \psi(x,t)]\\ &=h(x)\psi(x,t)+\int\psi^\dagger(x',t)v(x,x')\psi(x',t)dx'\psi(x,t)\end{aligned}\tag{24}$$

となることを注意しておく。

演習問題 2.

1. (1·30)式の $\Phi_{(k_1\cdots k_N)}(x_1,\cdots,x_N)$ を $k_1<k_2<\cdots<k_N$ にとっておくとき，(8)式の行列要素は次のようになることを示せ。

$$\begin{aligned}(k_1'\cdots k_N'|F|k_1\cdots k_N)&=\sum_{i=1}^{N}(k_i|f|k_i) && (\text{すべての } k_i=k_i' \text{ のとき})\\ &=(k_i'|f|k_i) && (k_i\neq k_i' \text{ で，他の } k_j=k_j' \text{ のとき})\\ &=0 && (2\text{個以上の } k_i \text{ が } k_i' \text{ と異なるとき})\end{aligned}$$

2. 前問と同じ条件のとき，次のようになることを示せ。

$$\Delta_{ii}=\prod_{j\neq i}\delta_{k_jk_j'}$$

$$\Delta_{ij}=0 \qquad (i\neq j)$$

3. 全粒子数 N は演算子として

$$N=\sum_k a_k{}^\dagger a_k=\int\psi^\dagger(x)\psi(x)dx$$

で与えられるが，(14) または (22) 式のハミルトニアンは N と可換であることを，Fermi，Bose 両粒子系に対して証明せよ。

4. (16)式の固有関数が互いに直交し，規格化されていることを示せ。

3. 変 分 法

3-1　一般的な原理

基底状態　系の基底状態は，Schrödinger 方程式

$$H\Phi=E\Phi \tag{1}$$

で，最低の固有値 E_0 を与える固有関数 Φ_0 に対応する。この E_0, Φ_0 を求めるには，(1)を解くかわりに

$$E=(\Phi,\ H\Phi) \tag{2}$$

を，Φ が規格化されているという条件

$$(\Phi,\ \Phi)=1 \tag{3}$$

の下で最小にするような関数 Φ_0 を求め，そのときの E の値を E_0 とすれば，この Φ_0, E_0 が基底状態とそのエネルギーを与えていることは，よく知られている。

さて (3) の条件のもとで (2) を最小にするように Φ を選ぶ。それには Lagrange (ラグランジュ) の未定係数法を使って

$$F=(\Phi,\ H\Phi)-\lambda(\Phi,\ \Phi) \tag{4}$$

という関数を，条件なしに最小にする Φ_0 をつくり，λ の値として $(\Phi_0, \Phi_0)=1$ になるものをとればよい。そこで

$$\Phi=\Phi_0+\delta\Phi$$

とおいて，$\delta\Phi$ は微少量として F を展開すると，$\Phi=\Phi_0$ のとき F が最小であるということは，$\delta\Phi$ の 1 次の項が 0 で，2 次の項が常に正であるということである。そこで十分条件として 1 次の項を 0 とおいた式をつくると

$$\begin{aligned}\delta F&=(\delta\Phi,\ H\Phi_0)+(\Phi_0,\ H\delta\Phi)-\lambda(\delta\Phi,\ \Phi_0)-\lambda(\Phi_0,\ \delta\Phi)\\&=(\delta\Phi,\ (H-\lambda)\Phi_0)+((H-\lambda)\Phi_0,\ \delta\Phi)\\&=0\end{aligned}$$

となる。この式が任意の $\delta\boldsymbol{\Phi}$ に対して成り立つためには

$$(H-\lambda)\boldsymbol{\Phi}_0=0$$

でなければならないことがすぐにわかる。つまり $\boldsymbol{\Phi}_0$ は H の固有関数になっていなければならない。また規格化の条件(3)は λ に関係なく満たすことができる。そしてこのとき $E=\lambda$, したがって $F=0$ になることもすぐにわかる。

以上は F の変化のうち $\delta\boldsymbol{\Phi}$ の1次の項を0としたこと，つまり F が $\boldsymbol{\Phi}$ の変化に対し"定常的"であることから導かれたものであるが，もし F が最小になっていれば，$\boldsymbol{\Phi}_0$ は基底状態の波動関数になり，そのエネルギーは $(\boldsymbol{\Phi}_0, \boldsymbol{\Phi}_0)=1$ にとっておけば，

$$E_0=(\boldsymbol{\Phi}_0,\ H\boldsymbol{\Phi}_0) \tag{5}$$

で与えられることになる*。

励起状態 次に励起状態について考える。基底状態の波動関数 $\boldsymbol{\Phi}_0$ がわかっているとき，励起状態の波動関数 $\boldsymbol{\Phi}_1$ は $\boldsymbol{\Phi}_0$ と直交していなければならない。すなわち

$$(\boldsymbol{\Phi}_1,\ \boldsymbol{\Phi}_0)=0 \tag{6}$$

ここで規格化条件(3)と直交条件(6)のもとで(2)を最小にすることを考える。それには

$$F_1=(\boldsymbol{\Phi},\ H\boldsymbol{\Phi})-\lambda_1(\boldsymbol{\Phi},\ \boldsymbol{\Phi})-\mu\{(\boldsymbol{\Phi}_0,\ \boldsymbol{\Phi})+(\boldsymbol{\Phi},\ \boldsymbol{\Phi}_0)\} \tag{7}$$

とおいて，$\boldsymbol{\Phi}$ の微少な変化 $\delta\boldsymbol{\Phi}$ に対し $\delta F_1=0$ とおく。このときの $\boldsymbol{\Phi}$ を $\boldsymbol{\Phi}_1$ と書くと

$$(H-\lambda_1)\boldsymbol{\Phi}_1-\mu\boldsymbol{\Phi}_0=0 \tag{8}$$

となる。λ_1, μ は(3), (6)が成り立つように選ぶ。直交条件(6)が成り立つためには

$$(H-\lambda_1)\boldsymbol{\Phi}_1=0, \qquad \mu=0$$

で，$\lambda_1 \neq E_0$ であればよいことがわかる。したがって(7)の F_1 を最小にする F_1 は，励起状態としてはエネルギーが最低のものを与え，そのエネルギーは

$$\lambda_1=(\boldsymbol{\Phi}_1,\ H\boldsymbol{\Phi}_1)$$

で与えられることになる。

この変分法を完全に正確に行なうことは，Schrödinger 方程式を正確に

---

* ここの議論は，Lagrange の未定係数法を使わなくても，

$$W=(\boldsymbol{\Phi},\ H\boldsymbol{\Phi})/(\boldsymbol{\Phi},\ \boldsymbol{\Phi})$$

とおいて，W が最小になるように $\boldsymbol{\Phi}$ をきめても，全く同じ結果が得られる。

解くことと同じであり，この点ではとくに便利になるわけではない。しかし変分に使う波動関数として計算しやすい形，したがって限られた範囲内のものだけをとって，近似的な波動関数とエネルギーを求めることができる。するとこのときの近似的なエネルギーは真の値よりも小さくならないことは次のようにして示され，異なった近似を比較するとき，エネルギーの低い方がよい近似ということができ，変分法は近似の良否を判定できる点で便利である。変分によって真のエネルギーの値が得られるのは，波動関数として許される空間すべてにわたって変化させて最小値を求めた場合である。近似的な波動関数を用いることは，この空間全部ではなく，ある限られた部分空間だけで変化させることなので，真の値には到達しえないことがありうる。したがって変分によって求められた近似的なエネルギーは，真の値より低くなることはない。

3-2 Bose 粒子系における Feynmann の方法

変分法を多体問題に応用して，みごとな成功を収めた典型的な例として，液体ヘリウムにおけるフォノン，ロトンのエネルギー・スペクトルを導出した Feynmann(ファインマン)の仕事がある*。まず液体ヘリウムのハミルトニアンとして

$$H=\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}_j{}^2+U(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N) \tag{9}$$

をとる。$\boldsymbol{p}_j$, $\boldsymbol{r}_j$ はヘリウム原子の運動量と空間座標である。

変分関数とエネルギーの計算　さて液体ヘリウムの基底状態の波動関数を $\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)$，エネルギーを E_0 とする。つまり

$$H\boldsymbol{\Phi}=E_0\boldsymbol{\Phi} \tag{10}$$

また $\boldsymbol{\Phi}$ は全運動量 $\boldsymbol{P}=\sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{p}_j$ の固有関数で，固有値は 0，すなわち

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Phi}=0 \tag{11}$$

である。さらに基底状態は縮退していないとすれば $\boldsymbol{\Phi}$ は実数である**。

ここで励起状態の波動関数として

$$\Psi=F\boldsymbol{\Phi}=\sum_{j=1}^{N}f(\boldsymbol{r}_j)\boldsymbol{\Phi} \tag{12}$$

---

* R. P. Feynmann: Phys. Rev. **94**, 267 (1954).

** もし $\boldsymbol{\Phi}$ が複素数とすれば，H は実数なのでその複素共役 $\boldsymbol{\Phi}^*$ も $H\boldsymbol{\Phi}^*=E_0\boldsymbol{\Phi}^*$ を満たし，基底状態が縮退していないという仮定に反する。

という形を仮定する。これが $\boldsymbol{\Phi}$ と直交していること，つまり

$$(\boldsymbol{\Phi},\ \boldsymbol{\Psi})=\sum_{j=1}^{N}\int\cdots\int f(\boldsymbol{r}_j)\boldsymbol{\Phi}^2 d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N=0 \tag{13}$$

という条件の下で，そのエネルギー期待値

$$W=(\boldsymbol{\Psi},\ H\boldsymbol{\Psi})/(\boldsymbol{\Psi},\ \boldsymbol{\Psi}) \tag{14}$$

を最小にするように $f(\boldsymbol{r})$ の形をきめる。(14)の分子に現われる $H\boldsymbol{\Psi}$ は，次のように計算できる。

$$\begin{aligned}H\boldsymbol{\Psi}&=-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{N}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}_j{}^2}(F\boldsymbol{\Phi})+UF\boldsymbol{\Phi}\\&=F(H\boldsymbol{\Phi})-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\partial^2 F}{\partial\boldsymbol{r}_j{}^2}\boldsymbol{\Phi}+2\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{r}_j}\frac{\partial\boldsymbol{\Phi}}{\partial\boldsymbol{r}_j}\right)\\&=E_0\boldsymbol{\Psi}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\boldsymbol{\Phi}}\sum_{j=1}^{N}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}_j}\left(\frac{\partial F}{\partial\boldsymbol{r}_j}\boldsymbol{\Phi}^2\right)\end{aligned}$$

したがって

$$(\boldsymbol{\Psi},\ H\boldsymbol{\Psi})=E_0(\boldsymbol{\Psi},\ \boldsymbol{\Psi})+\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{N}\int\cdots\int\frac{\partial f^*}{\partial\boldsymbol{r}_j}\frac{\partial f}{\partial\boldsymbol{r}_j}\boldsymbol{\Phi}^2 d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N$$

となる。他方(14)の分母は(12)を使えば

$$(\boldsymbol{\Psi},\ \boldsymbol{\Psi})=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\int\cdots\int f^*(\boldsymbol{r}_i)f(\boldsymbol{r}_j)\boldsymbol{\Phi}^2 d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N$$

と書ける。ここで

$$\rho_N(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=\boldsymbol{\Phi}^2(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N) \tag{15}$$

は，基底状態におけるヘリウム原子の分布関数(N 個の分子が $\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N$ にいる確率)を表わすが，さらに n 個 ($n<N$) の原子の分布関数*を

$$\rho_n(\boldsymbol{R}_1,\cdots,\boldsymbol{R}_n)=\sum_{j_1=1}^{N}\cdots\sum_{j_n=1}^{N}\int\cdots\int\delta(\boldsymbol{r}_{j_1}-\boldsymbol{R}_1)\cdots\delta(\boldsymbol{r}_{j_n}-\boldsymbol{R}_n)\times\rho_N(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N \tag{16}$$

のように定義する。とくに

$$\rho_1(\boldsymbol{R})=\sum_{j=1}^{N}\int\cdots\int\delta(\boldsymbol{r}_j-\boldsymbol{R})\,\rho_N d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N$$

は1個の原子が点 $\boldsymbol{R}$ にいる確率であるが，系は空間的に一様なのでこれは $\boldsymbol{R}$ によらず一定で，原子数密度 $\rho_0=N/\Omega$ (Ω は系の占める体積) に等しい。すなわち

---

* ρ_N は 1-2 で述べた密度行列の対角要素であり，ρ_n は n 体の密度行列の対角要素になっている。ただしすべて 0 K での値である。

$$\rho_1(\boldsymbol{R})=\rho_0 \tag{17}$$

また2個の原子の分布関数 $\rho_2(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2)$ はその相対距離 $|\boldsymbol{R}_1-\boldsymbol{R}_2|$ だけの関数であり，これを

$$\rho_2(\boldsymbol{R}_1, \boldsymbol{R}_2)=\rho_0 p(\boldsymbol{R}_1-\boldsymbol{R}_2) \tag{18}$$

と書くと，$p(\boldsymbol{r})$ は原点に一つの原子がいるとき，点 $\boldsymbol{r}$ に他の原子がいる条件つきの確率を表わす。

$(\Psi, H\Psi)$ と (Ψ, Ψ) は，この ρ_0 と $p(\boldsymbol{r})$ を使って表わすことができ，(14)は

$$W=E_0+\frac{\hbar^2}{2m}\int\frac{\partial f^*(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}}\frac{\partial f(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}}d^3\boldsymbol{r}\Big/\int f^*(\boldsymbol{r}_1)f(\boldsymbol{r}_2)p(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2 \tag{19}$$

と表わされる。この W を f^* について変分をとって0とおくと

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 f(\boldsymbol{r})}{\partial \boldsymbol{r}^2}=(W-E_0)\int f(\boldsymbol{r}')p(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}' \tag{20}$$

という式が得られる。(20)は

$$f(\boldsymbol{r})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{21}$$

$$W-E_0=\frac{\hbar^2k^2}{2mS(\boldsymbol{k})}\equiv\epsilon_{\boldsymbol{k}} \tag{22}$$

$$S(\boldsymbol{k})=\int p(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}d\boldsymbol{r} \tag{23}$$

という解をもつことがすぐにわかる。

f として(21)の形を使えば，(12)の Ψ は全運動量 $\boldsymbol{P}$ の固有関数で，

$$\boldsymbol{P}\Psi=\hbar\boldsymbol{k}\Psi \tag{24}$$

を満たすことがわかる。ただし Φ は(11)を満たすことを用いた。したがって $\boldsymbol{k}\neq0$ であれば，Ψ も Φ も $\boldsymbol{P}$ の固有関数であり，その固有値は異なるから互いに直交し，(13)が成り立つことになる。いいかえると，Ψ は全運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ をもつ状態中の最低エネルギーの状態であり，Φ は全運動量0の最低エネルギーの状態である。この Ψ がフォノンまたはロトンが1個存在する状態に対応しているとし，$\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ はフォノンまたはロトンのエネルギーを表わしていると考える。したがって(22)がフォノン，ロトンのエネルギー・スペクトルを表わしているが，これを $\boldsymbol{k}$ の関数として調べるには $S(\boldsymbol{k})$ の知識が必要である。

$S(\boldsymbol{k})$ の決定 $S(\boldsymbol{k})$ は，中性子または X 線散乱の実験から求めることができる。中性子または X 線が波数 $\boldsymbol{k}_0$ で入射し，液体ヘリウムで弾性散乱されて波数 $\boldsymbol{k}_1$ で出てゆく確率を考える。散乱は個々の原子核または原子で

おこり，点 $\boldsymbol{r}$ にある原子によって散乱された波の振幅は $\exp\{i(\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_1)\cdot\boldsymbol{r}\}$ に比例する*。したがって散乱波の振幅は

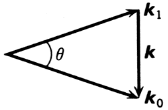
$$\sum_{j=1}^{N} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_j}, \qquad \boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_1$$

に比例し，その強度は

$$\left|\sum_{j=1}^{N} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_j}\right|^2=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}$$

に比例する。液体ヘリウムは基底状態 $\boldsymbol{\Phi}$ にあるものとしてこれを平均すると

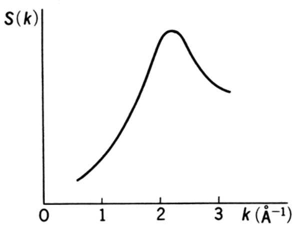
$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\int\cdots\int e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j)}\boldsymbol{\Phi}^2(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)\,d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N$$
$$=\iint e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)}\rho_2(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\,d^3\boldsymbol{r}_1 d^3\boldsymbol{r}_2$$
$$=\rho_0\Omega\int e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}p(\boldsymbol{r})\,d^3\boldsymbol{r}$$
$$=NS(\boldsymbol{k})$$



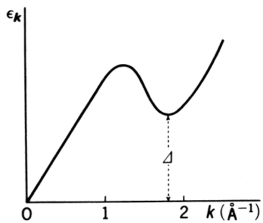
3·1 図　散乱の波数ベクトルと散乱角

となり，散乱波の強度から $S(\boldsymbol{k})$ が直接求められることになる**。とくに弾性散乱であるから，$|\boldsymbol{k}_0|=|\boldsymbol{k}_1|$ なので，$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k}_1$ の大きさは散乱角 θ によってきまる (3·1 図)。したがって散乱波の強度の角度分布が $S(\boldsymbol{k})$ を直接示していることになる。

中性子散乱によると $S(\boldsymbol{k})$ は 3·2 図のような形をしている***。この実験からは $\boldsymbol{k}$ の小さい所の $S(\boldsymbol{k})$ の様子はわからないが，Feynmann は物



3·2 図　液体ヘリウムにおける中性子散乱強度



3·3 図　液体ヘリウムの励起エネルギー

*　このことは二つの原子によって散乱された波の位相差は，原子間の距離を $\boldsymbol{r}$ とすれば，$(\boldsymbol{k}_0-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}$ で与えられるということである。

**　このことから，$S(\boldsymbol{k})$ を液体ヘリウムの**構造因子** (form factor) とよぶ。

***　D. G. Henshaw: Phys. Rev. **119**, 9 (1960).

理的な議論によって原点付近の $S(k)$ を予測し，それを用いて(22)の ϵ_k の曲線をかいた。それが 3·3 図であるが，原点付近はフォノン的 ($\epsilon_k \propto k$) であり，$k \sim 2\,\text{Å}^{-1}$ 付近で極小になり，これがロトンに対応している。

この Feynmann の結果を他のデータ(たとえば比熱)から得られる ϵ_k の曲線と比べると，極小値 Δ が実験値の 2 倍程度になっていること以外はきわめてよくあっている。Feynmann はさらに近似をあげて ϵ_k を計算し，実験値との不一致を 1/3 に縮めることに成功している*。

3-3　超伝導の BCS 理論

1-5 で述べたように超伝導のいろいろな性質をきわめて巧妙に説明する理論が Bardeen, Cooper, Schrieffer の 3 人 (BCS と略記) によって提出された**。彼らは電子間の相互作用が Fermi 面付近では引力になっていると想像した。そしてハミルトニアンとして

$$H=\sum_{k,\sigma}\epsilon_k a_{k\sigma}{}^\dagger a_{k\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{q}\sum_{k,k'}\sum_{\sigma,\sigma'}V_{k,k',q}a_{k+q,\sigma}{}^\dagger a_{k'-q,\sigma'}{}^\dagger a_{k'\sigma'}a_{k\sigma} \tag{25}$$

という形をとった。ただし $a_{k\sigma}$, $a_{k\sigma}{}^\dagger$ は運動量 $\boldsymbol{k}$, スピン σ(↑または↓)をもった電子を消したりつくったりする演算子で，ϵ_k は Fermi 面から測った電子 1 個のエネルギーである。相互作用が引力であるというのは，行列要素 $V_{kk',q}$ が負であるということで，BCS はその引力の範囲は Fermi 面の上下で幅 ω_D の範囲内だけであると仮定した。

基底状態の変分関数とエネルギー期待値　BCS はまず基底状態の波動関数として

$$\Phi_0=\prod_k(u_k+v_k a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{-k\downarrow}{}^\dagger)|0\rangle \tag{26}$$

$$u_k{}^2+v_k{}^2=1 \tag{27}$$

という形を仮定し，u_k, v_k を変分によって求めた。ただし $|0\rangle$ は電子が全くいない真空の状態であり，また(26)では全電子数は一定でないので，その平均値がある一定値 N に等しいとおく。つまり

$$(\Phi_0,\ \sum_{k,\sigma}a_{k\sigma}{}^\dagger a_{k\sigma}\Phi_0)=N \tag{28}$$

---

*　R. P. Feynmann & M. Cohen: Phys. Rev. **102**, 1189 (1956).

**　J. Bardeen, L. Cooper and J. Schrieffer: Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).

(26)の Φ が規格化されていることは,

$$(\Phi,\ \Phi)=\langle 0|\prod_{k}(u_k+v_k a_{-k\downarrow}a_{k\uparrow})\prod_{k}(u_k+v_k a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{-k\downarrow}{}^\dagger)|0\rangle$$
$$=\langle 0|\prod_{k}\{(u_k+v_k a_{-k\downarrow}a_{k\uparrow})(u_k+v_k a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{-k\downarrow}{}^\dagger)\}|0\rangle$$
$$=\prod_{k}(u_k{}^2+v_k{}^2)=1$$

と容易に示すことができる。

さてこの Φ を用いてエネルギーの期待値

$$W_0=(\Phi,\ H\Phi) \tag{29}$$

を計算する。まず第一項は

$$(\Phi,\ a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{k\uparrow}\Phi)=\langle 0|(u_k+v_k a_{-k\downarrow}a_{k\uparrow})a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{k\uparrow}(u_k+v_k a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{-k\downarrow}{}^\dagger)|0\rangle$$
$$=v_k{}^2$$
$$(\Phi,\ a_{-k\downarrow}{}^\dagger a_{-k\downarrow}\Phi)=\langle 0|(u_k+v_k a_{-k\downarrow}a_{k\uparrow})a_{-k\downarrow}{}^\dagger a_{-k\downarrow}(u_k+v_k a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{-k\downarrow}{}^\dagger)|0\rangle$$
$$=v_k{}^2$$

を用いれば

$$2\sum\epsilon_k v_k{}^2$$

となる。また(28)の条件は

$$2\sum_{k}v_k{}^2=N \tag{28$'$}$$

と書くことができる。H の第二項の期待値では, $\boldsymbol{k}=-\boldsymbol{k}'$, $\sigma=-\sigma'$ という項と, $q=0$, $\boldsymbol{k}\sigma$, $\boldsymbol{k}'\sigma'$ は任意および $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$, $\sigma=\sigma'$ という三つの場合だけが残るが, 後の二つの項は第一項と同じ形をしているので, 相互作用は小さいとして無視してしまう。第一の場合は

$$(\Phi,\ a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{-k\downarrow}{}^\dagger a_{-k'\downarrow}a_{k'\uparrow}\Phi)=\langle 0|(u_k+v_k a_{-k\downarrow}a_{k\uparrow})a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{-k\downarrow}{}^\dagger(u_k+v_k a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{-k\downarrow}{}^\dagger)$$
$$\times(u_{k'}+v_{k'}a_{-k'\downarrow}a_{k'\uparrow})a_{-k'\downarrow}a_{k'\uparrow}$$
$$\times(u_{k'}+v_{k'}a_{k'\uparrow}{}^\dagger a_{-k'\downarrow}{}^\dagger)|0\rangle$$
$$=u_k v_k u_{k'}v_{k'}$$

であるから, 第二項の期待値は $\sum_{k}\sum_{k'}V_{kk'}u_k v_k u_{k'}v_{k'}$ となる。こうして(29)のエネルギーは

$$W_0=2\sum\epsilon_k v_k{}^2+\sum_{k}\sum_{k'}V_{kk'}(uv)_k(uv)_{k'} \tag{30}$$

と書ける。この W を(27)の条件の下で最小にすればよい。

基底エネルギーの変分方程式と解　W を(27)の下で最小にするには

$$\frac{du_k}{dv_k}=-\frac{v_k}{u_k}$$

であることを使って，$\partial W/\partial v_{\boldsymbol{k}}=0$ をつくればよいが，その式は

$$4\epsilon_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}+2\left(u_{\boldsymbol{k}}-\frac{v_{\boldsymbol{k}}^2}{u_{\boldsymbol{k}}}\right)\sum_{\boldsymbol{k}'}V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(uv)_{\boldsymbol{k}'}=0$$

つまり

$$2\epsilon_{\boldsymbol{k}}(uv)_{\boldsymbol{k}}-\Delta(\boldsymbol{k})(u_{\boldsymbol{k}}^2-v_{\boldsymbol{k}}^2)=0 \tag{31}$$

となる。ただし $\Delta(\boldsymbol{k})$ は

$$\Delta(\boldsymbol{k})=-\sum_{\boldsymbol{k}'}V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}(uv)_{\boldsymbol{k}'} \tag{32}$$

で定義される量である。(31)と(27)を $u_{\boldsymbol{k}}$, $v_{\boldsymbol{k}}$ について解くと

$$\left.\begin{aligned}u_{\boldsymbol{k}}^2&=\frac{1}{2}\left(1+\frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}\right)\\ v_{\boldsymbol{k}}^2&=\frac{1}{2}\left(1-\frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}\right)\end{aligned}\right. \tag{33}$$

$$E_{\boldsymbol{k}}=\{\epsilon_{\boldsymbol{k}}^2+\Delta^2(\boldsymbol{k})\}^{1/2} \tag{34}$$

が得られ，これを使って(32)を書き直すと $\Delta(\boldsymbol{k})$ に対する方程式

$$\Delta(\boldsymbol{k})=-\sum_{\boldsymbol{k}'}V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\frac{\Delta(\boldsymbol{k}')}{2\{\epsilon_{\boldsymbol{k}'}^2+\Delta^2(\boldsymbol{k}')\}^{1/2}} \tag{35}$$

が得られる。この(35)は一般に解くことはできないので，相互作用について次の仮定をする。

$$\begin{aligned}V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}&=-V \qquad (|\epsilon_{\boldsymbol{k}}|,\ |\epsilon_{\boldsymbol{k}'}|<\omega_{\mathrm{D}})\\ &=0 \qquad (|\epsilon_{\boldsymbol{k}}|>\omega_{\mathrm{D}}\ \text{または}\ |\epsilon_{\boldsymbol{k}'}|>\omega_{\mathrm{D}})\end{aligned} \tag{36}$$

この仮定は前にもふれたように，引力は Fermi 面の上下で幅 ω_{D} の範囲内だけに働いていると考えるもので，その外側で $V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}$ が 0 ということは，そこでは変分のパラメータ $u_{\boldsymbol{k}}$ または $v_{\boldsymbol{k}}$ を 0 つまり $u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}=0$ にとったとすればよい。(36)を仮定すれば，(32)で与えられる $\Delta(\boldsymbol{k})$ は $\boldsymbol{k}$ によらない定数 Δ_0 になり，その方程式は(35)から

$$1=\frac{V}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}{}'\frac{1}{(\epsilon_{\boldsymbol{k}}^2+\Delta_0^2)^{1/2}} \tag{37}$$

となる。ただし $\sum_{\boldsymbol{k}}'$ は $|\epsilon_{\boldsymbol{k}}|<\omega_{\mathrm{D}}$ という状態についての和である。ここで $\boldsymbol{k}$ についての和を $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ についての積分に書きかえる。それには $\epsilon_{\boldsymbol{k}}=\epsilon$ であるような状態の数，つまり状態密度を $\rho(\epsilon)$ として

$$\sum_{\boldsymbol{k}} \longrightarrow \int\rho(\epsilon)d\epsilon$$

と書く。さらにこの状態密度 $\rho(\epsilon)$ は，Fermi 面 $\epsilon=0$ の近くでは比較的

緩やかな変化をしていると考えられるので，(37)を

$$1=\frac{1}{2}\rho(0)V\int_{-\omega_D}^{\omega_D}\frac{d\epsilon}{(\epsilon^2+\Delta_0{}^2)^{1/2}}$$

と近似する。するとこの積分は容易に計算でき，Δ_0 として

$$\Delta_0=\frac{\omega_D}{\sinh\{1/\rho(0)V\}} \tag{38}$$

が得られる。

(33)の u_k, v_k を使って(30)の基底状態のエネルギー W_0 を計算すると

$$W_0=W_0{}^0-2\frac{\rho(0)\omega_D{}^2}{\exp\{2/\rho(0)V\}-1} \tag{39}$$

となる。ただし $W_0{}^0$ は，$\Delta_0=0$ のときつまり常伝導状態でのエネルギーである。$\rho(0)$ はほぼ Fermi エネルギー ϵ_F の逆数の程度なので，$\rho(0)V$ はふつう 1 に比べてきわめて小さい。この場合(38), (39)はそれぞれ

$$\Delta_0=2\omega_D e^{-\{1/\rho(0)V\}} \tag{38'}$$

$$W_0=W_0{}^0-2\rho(0)\omega_D{}^2 e^{-\{2/\rho(0)V\}} \tag{39'}$$

となる。

励起状態 基底状態では，(26)の波動関数からわかるように，$\boldsymbol{k}\uparrow$ という状態に電子がいれば $-\boldsymbol{k}\downarrow$ にもいる。また一方が空いていれば他方も空いている。励起状態をつくるには，まずこの相関を切り，電子は $\boldsymbol{k}\uparrow$ にはいるが $-\boldsymbol{k}\downarrow$ は空いており，もう一方の電子は $-\boldsymbol{k}'\downarrow(\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{k}')$ にいるという状態を考えればよい。これの波動関数 $\Psi_{kk'}$ は

$$\Psi_{kk'}=a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{-k'\downarrow}{}^\dagger\prod_{k_1\neq k,k'}(u_{k_1}+v_{k_1}a_{k_1\uparrow}{}^\dagger a_{-k_1\downarrow}{}^\dagger)|0\rangle \tag{40}$$

と書け，これが基底状態の波動関数に直交していることは容易に示される。この状態でのエネルギー $W_{kk'}$ は次のようにして計算できる。まず $a_{l\sigma}{}^\dagger a_{l\sigma}$ の期待値は，$l\sigma\neq\boldsymbol{k}\uparrow, -\boldsymbol{k}\downarrow, \boldsymbol{k}'\uparrow, -\boldsymbol{k}'\downarrow$ のときは基底状態と同じで，違うものは

$$(\Psi_{kk'},\ a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{k\uparrow}\Psi_{kk'})=1, \qquad (\Psi_{kk'},\ a_{-k\downarrow}{}^\dagger a_{-k\downarrow}\Psi_{kk'})=0$$

$$(\Psi_{kk'},\ a_{-k'\downarrow}{}^\dagger a_{-k'\downarrow}\Psi_{kk'})=1, \qquad (\Psi_{kk'},\ a_{k'\uparrow}{}^\dagger a_{k'\uparrow}\Psi_{kk'})=0$$

だけである。相互作用エネルギーでは，(30)の第二項の和の中で $\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}'$ を除いたものになっている。したがって

$$W_{kk'}=W_0+\epsilon_k(1-2v_k{}^2)+\epsilon_{k'}(1-2v_{k'}{}^2)$$
$$+V{\sum_l}'(uv)_l\{(uv)_k+(uv)_{k'}\} \tag{41}$$

となる。(41)に u_l, v_l の形を代入して計算すると

$$W_{kk'}=W_0+E_k+E_{k'} \tag{42}$$

$$E_k=(\epsilon_k{}^2+\Delta_0{}^2)^{1/2} \tag{43}$$

となる。これは運動量 $\boldsymbol{k}$ の電子を励起するのに(43)で与えられる E_k だけの励起エネルギーが必要であることを表わしている。この励起エネルギーはけっして0にならず，必ず Δ_0 より大きい。ふつうの金属での励起エネルギー ϵ_k は0から連続につながっていることと比べて E_k は常に Δ_0 より大きいので，この Δ_0 を**エネルギー・ギャップ**とよぶ。そしてこのエネルギー・ギャップの存在から超伝導体の特徴であるいろいろな性質が説明できる。

3-4　有限温度における変分法

以上は，基底状態および基底状態に近い励起状態のエネルギーと波動関数を求めるための変分法であったが，次に有限温度での変分法を考える。有限温度ではどんな励起状態でも，それが実現されている確率は0ではないので，一つ一つの量子力学的状態に対して前節までのような変分を実行するわけにはいかない。問題になるのは，状態和

$$Z=\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H}] \tag{44}$$

または自由エネルギー

$$F=-k_{\mathrm{B}}T\log Z \tag{45}$$

であり，波動関数のかわりに密度行列

$$\rho=e^{-\beta H}/Z, \qquad \beta=1/k_{\mathrm{B}}T \tag{46}$$

を考えると便利である。

まず自由エネルギー F は密度行列 ρ を使って

$$F=\mathrm{Tr}\,[\rho H]+k_{\mathrm{B}}T\,\mathrm{Tr}\,[\rho\log\rho] \tag{47}$$

と表わされることに注意する。これの第一項は内部エネルギー E であり，第二項がエントロピー $\mathscr{S}$ に $(-T)$ を掛けたものである。つまり

$$E=\mathrm{Tr}\,[\rho H], \qquad \mathscr{S}=-k_{\mathrm{B}}\,\mathrm{Tr}\,[\rho\log\rho]$$

である。(47)の F を ρ の汎関数と考えると，ρ が(46)の関数形のときに F は極小値をとることが証明できる。それには任意のハミルトニアン H_1 を用いて

$$\rho_1=e^{-\beta H_1}/Z_1, \qquad Z_1=\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H_1}] \tag{48}$$

と表わし,

$$H_1=H+\delta H$$

であるとして，F を δH で展開する。そして δH の1次の項は消え，2次の項は常に正であることを示せばよい。

まず(48)を(47)に代入すると

$$F_1=\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H_1}(H-H_1)]/Z_1-kT\log Z_1 \tag{49}$$

となることに注意する。

ここで δH について展開するのであるが，H と δH とは必ずしも可換であるとはかぎらないので，次の公式を利用する。

$$e^{-\beta(H+\delta H)}=e^{-\beta H}\Big\{1-\int_0^\beta d\lambda e^{\lambda H}\delta He^{-\lambda H}$$
$$+\int_0^\beta d\lambda_1\int_0^{\lambda_1}d\lambda_2 e^{\lambda_1 H}\delta He^{-\lambda_1 H}e^{\lambda_2 H}\delta He^{-\lambda_2 H}-\cdots\Big\} \tag{50}$$

(50)の証明　まず

$$u(\beta)=e^{\beta H}e^{-\beta(H+\delta H)}$$

とおくと，$u(\beta)$ は

$$\frac{\partial u(\beta)}{\partial\beta}=e^{\beta H}He^{-\beta(H+\delta H)}+e^{\beta H}\{-(H+\delta H)\}e^{-\beta(H+\delta H)}$$
$$=-e^{\beta H}\delta He^{-\beta(H+\delta H)}$$
$$=-e^{-\beta H}\delta He^{\beta H}u(\beta) \tag{51}$$

という微分方程式を満たす。これを積分方程式の形にすると，$u(0)=1$ であるから

$$u(\beta)=1-\int_0^\beta d\lambda e^{\lambda H}\delta H^{-\lambda H}u(\lambda) \tag{52}$$

となり，これを逐次近似で解けば(50)が得られる。(証明終わり)

(50)の跡をとれば $Z_1=\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H_1}]$ が得られるが，(44)および

$$\langle A\rangle=\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H}A]/Z \tag{53}$$

と書くことにすると,

$$Z_1=Z\Big\{1-\beta\langle\delta H\rangle+\int_0^\beta d\lambda_1\int_0^{\lambda_1}d\lambda_2\langle\delta He^{-(\lambda_1-\lambda_2)H}\delta He^{(\lambda_1-\lambda_2)H}\rangle+\cdots\Big\} \tag{54}$$

となる。ただし $\mathrm{Tr}\,[AB]=\mathrm{Tr}\,[BA]$ という性質を使っている。

(50), (54) を(49)に代入して δH について展開すると，δH の1次の項はたしかに0になり，δH の2次までの範囲では

$$F_1=-k_{\mathrm{B}}T\log Z-\frac{1}{2}\beta\langle\delta H\rangle^2+\int_0^\beta d\lambda\langle\delta He^{-\lambda H}\delta He^{\lambda H}\rangle$$
$$-\frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\lambda_1\int_0^{\lambda_1}d\lambda_2\langle\delta He^{-(\lambda_1-\lambda_2)H}\delta He^{(\lambda_1-\lambda_2)H}\rangle \tag{55}$$

となることがわかる。これの第一項はたしかに熱平衡における自由エネルギー(45)であるから，第二項以下が負にならないことを示せばよい。(55)の最後の2重積分は

$$\lambda_1+\lambda_2=2\Lambda,\qquad \lambda_1-\lambda_2=\lambda$$

とおいて変数変換をすれば，Λ についての積分は直ちに実行できて

$$-\frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\lambda(\beta-\lambda)\langle\delta He^{-\lambda H}\delta He^{\lambda H}\rangle$$

となる。これを(55)に入れれば

$$F_1=-k_BT\log Z+\frac{1}{\beta}\int_0^\beta d\lambda\lambda\{\langle\delta He^{-\lambda H}\delta He^{\lambda H}\rangle-\langle\delta H\rangle^2\}\qquad(56)$$

となることがわかる。したがってこれの第二項の { } の中が負にならないことを示せばよい。そこで H を対角化する表示をとり，H の固有値を E_n, δH の行列要素を δH_{nm} と書くと

$$\begin{aligned}\langle\delta He^{-\lambda H}\delta He^{\lambda H}\rangle&=\frac{1}{Z}\sum_{n,m}\sum e^{-\beta E_n}|\delta H_{nm}|^2e^{-\lambda(E_m-E_n)}\\&=\frac{1}{Z}\left\{\sum_n e^{-\beta E_n}(\delta H_{nn})^2+\sum_{n\neq m}\sum e^{-\beta E_n}|\delta H_{nm}|^2\,e^{-\lambda(E_m-E_n)}\right\}\\&\geq\sum_n e^{-\beta E_n}(\delta H_{nn})^2/\sum_n e^{-\beta E_n}=\langle(\delta H_{nn})^2\rangle\end{aligned}$$

であり*

$$\langle\delta H\rangle=\sum_n e^{-\beta E_n}\delta H_{nn}/\sum_n e^{-\beta E_n}=\langle\delta H_{nn}\rangle$$

であるから

$$\langle\delta He^{-\lambda H}\delta He^{\lambda H}\rangle-\langle\delta H\rangle^2\geq\langle(\delta H_{nn}-\langle\delta H_{nn}\rangle)^2\rangle$$

となり，これは負にはならない。こうして

$$F_1\geq-k_BT\log Z=F\qquad(57)$$

が証明され，F_1 を最小にするような ρ_1 を選べば，その最小値は真の自由エネルギー F に一致し，そのときの ρ_1 は熱平衡の密度行列(46)になることがわかった。この ρ_1 に適当な近似的な形を仮定し，その形の中で F_1 を最小にするものを選べば，この近似の中では最善ということになる。これの応用については次章に述べることにする。

---

*　これは δH の対角部分の2乗の平均値である。

演習問題 3.

1.

$$W=\frac{(\Phi,\ H\Phi)}{(\Phi,\ \Phi)}$$

を最小にする Φ は，H の最低状態の波動関数になることを示せ。

2. 2変数 x, y の間に $g(x, y)=0$ という関係があるとき，$f(x, y)$ が極値をとる条件は

$$\frac{\partial}{\partial x}\{f(x, y)-\lambda g(x, y)\}=0$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\{f(x, y)-\lambda g(x, y)\}=0$$

で与えられることを示せ。ただし λ は $g(x, y)=0$ が成立するようにきめる。(Lagrange の未定係数法)

3. (39)式を証明せよ。

4. (40)式で $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'$ の場合は，Ψ は Φ と直交していない。この場合直交する波動関数をつくり，そのエネルギーはやはり(42)式で $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'$ とおいたものに一致することを示せ。

4. Hartree-Fock 近似

4-1 一般的な原理

相互作用をしている系でも，第一近似として粒子は独立に運動していると考えることが多い。この場合，各粒子はどんな運動をしていると考えたらよいかを，前章で述べた変分法を用いてきめようというのが **Hartree-Fock** (ハートリー・フォック) **近似**である。つまり Fermi 粒子系に対して，基底状態の波動関数を一つの行列式で表わし

$$\Phi=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \varphi_{k_1}(x_1) & \varphi_{k_2}(x_1) & \cdots & \varphi_{k_N}(x_1) \\ \varphi_{k_1}(x_2) & \varphi_{k_2}(x_2) & \cdots & \varphi_{k_N}(x_2) \\ \cdots\cdots & & \cdots & \cdots \\ \varphi_{k_1}(x_N) & \varphi_{k_2}(x_N) & \cdots & \varphi_{k_N}(x_N) \end{vmatrix} \tag{1}$$

という形にとるとき，最もよい軌道 $\varphi_{k_j}(x)$ を変分できめるのである。ただし(1)では，x_j は j 番目の粒子の座標とスピン変数を表わし，$\varphi_k(x)$ はスピン関数も含むものとし，規格化され互いに直交しているものとする。すなわち

$$\int\varphi_{k_i}{}^*(x)\varphi_{k_j}(x)\,dx=\delta_{ij} \qquad (2)^*$$

それにはハミルトニアン H が

$$H=\sum_{j=1}^{N}h(x_j)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j=1}^{N}\sum^{N}v(x_i,\,x_j) \tag{3}$$

という形をしているとして

$$W=(\Phi,\ H\Phi)$$

を計算し，(2) の条件の下で W を最小にする $\varphi_{k_i}(i=1,\,2,\cdots,N)$ をきめればよい。

---

* $\int dx$ はスピン変数についての和も含んでいるものとする。以下も同様である。

(1)を用いて W を計算すると，(2)を使えば

$$W=\sum_{j=1}^{N}(k_j|h|k_j)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j=1}^{N}\sum^{N}\{(k_ik_j|v|k_ik_j)-(k_ik_j|v|k_jk_i)\} \quad (4)$$

となることはすぐにわかる。ただし

$$\begin{aligned}(k|h|k)&=\int\varphi_k^*(x)h(x)\varphi_k(x)dx\\(kk'|v|k_1k_1')&=\iint\varphi_k^*(x)\varphi_{k'}^*(x')v(x,x')\varphi_{k_1}(x)\varphi_{k_1'}(x')dxdx'\end{aligned} \quad (5)$$

と書いた。(4)の相互作用の第一項は k_i, k_j にいる2粒子がそのまま相互作用をしているが，第二項では k_i, k_j にいる粒子は状態が入れかわって k_j, k_i に移っている。つまり二つの粒子が軌道を交換している。そこでこれを**交換相互作用**または**交換積分**とよぶ。これに対し第一項を直接積分とよぶ。交換相互作用は波動関数の対称性から生じたものであることを注意しておく。

さて(4)の W を(2)という条件下で最小にするには，まず Lagrange の未定係数法を使って

$$W-\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\lambda_{ij}(k_i|k_j)$$

の $\varphi_{k_j}{}^*(j=1,\cdots,N)$ についての変分を0にする。すると

$$\begin{aligned}h(x)\varphi_{k_j}(x)+\sum_{i=1}^{N}\Big\{&\iint\varphi_{k_i}{}^*(x')v(x,x')\varphi_{k_i}(x')dx'\varphi_{k_j}(x)\\&-\int\varphi_{k_i}{}^*(x')v(x,x')\varphi_{k_j}(x')dx\,\varphi_{k_i}(x)\Big\}=\sum_{i=1}^{N}\lambda_{ji}\varphi_{k_i}(x)\end{aligned} \quad (6)$$

という式が得られる。この式で左辺の相互作用の項では，$i=j$ という項は元来ないものであったが，直接積分と交換積分で互いに打ち消すので，入れておいたことを注意しておく。ここで

$$\rho(x,x')=\sum_{i=1}^{N}\varphi_{k_i}{}^*(x)\varphi_{k_i}(x') \quad (7)$$

を定義する。これは (1) で表わされる状態での1体の密度行列にほかならない。すると(6)は

$$\{h(x)+v_{\rm eff}(x)-A(x)\}\varphi_{k_j}(x)=\sum_{i=1}^{N}\lambda_{ji}\varphi_{k_i}(x) \quad (8)$$

という形に書ける。ただし $v_{\rm eff}(x)$ と $A(x)$ は

$$v_{\text{eff}}(x)=\int v(x,x')\rho(x',x')dx' \tag{9}$$

$$A(x)\varphi(x)=\int v(x,x')\varphi(x')\rho(x',x)dx' \tag{10}$$

で定義される演算子である。ところで(8)の左辺の { } 内は k_j によらない Hermite 演算子であり，その固有関数は互いに直交している。したがって φ_{k_j} をその固有関数にとれば，右辺の λ_{ji} は $j \neq i$ に対しては 0 にとることができる。つまり

$$\{h(x)+v_{\text{eff}}(x)-A(x)\}\varphi_{k_j}(x)=\epsilon_{k_j}\varphi_{k_j}(x) \tag{11}$$

であるような関数を ϵ_{k_j} の低い方から N 個つくって，それの行列式をつくれば基底状態の波動関数が得られることになる。ただしこれを実際に行なうことは一般的にはかなりむずかしい。それは(11)の v_{eff} と A は $\varphi_{k_j}(j=1,\cdots,N)$ を含んでいるため，本質的に (11) は非線形の方程式であるからである。原子における電子の軌道の計算にこの Hartree-Fock 近似がよく用いられるが，その際には次のような手続きをする。最初に適当な v_{eff} と A の形を仮定して(11)の解を求める。次にこの解を使って v_{eff} と A を計算し，その結果が最初に仮定した形に合えばよいが，合わないときはその結果を使って新しく (11) の解を求める。そしてその解を使って v_{eff} と A を計算する，… というようにして，φ_k を求めるときに使った v_{eff}, A が，φ_k を使って求めた v_{eff}, A と一致するまで計算を続ける。こうして求められた v_{eff} と A とを**自己無撞着場**(self-consistent field)とよぶ。この手続きはかなり面倒なので，この近似をさらに簡素化して，交換力 A を無視し，したがって直交性の問題も無視してしまう方法も考えられ，これを **Hartree 近似**とよぶ。

Hartree-Fock 近似における全エネルギー W は，(4)を書き直して

$$W=\sum_{j=1}^{N}\epsilon_{k_j}-\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N}\sum^{N}\{(k_ik_j|v|k_ik_j)-(k_ik_j|v|k_jk_i)\} \tag{12}$$

と書ける。第二項は ϵ_{k_j} の和の中では 2 電子の間の相互作用を二度ずつ数えていることになるので，差し引いたものである。

4-2 第二量子化における Hartree-Fock 近似

2 章で述べたように，行列式を使った方式に比べると，第二量子化の方法はきわめて便利なので，Hartree-Fock 近似も第二量子化のハミルトニ

アンを使って書き直す。書き直すこと自体は余り重要ではないが，ハミルトニアンの形をはっきりと示せるので，より高い近似に進むときなど便利である。

まずハミルトニアンとして(2·14)の形，つまり

$$H=\sum_{k,k'}(k|h|k')a_k{}^\dagger a_{k'}+\frac{1}{2}\sum_{k_1,k_2,}\sum_{k_1',k_2'}(k_1k_2|v|k_1'k_2')a_{k_1}{}^\dagger a_{k_2}{}^\dagger a_{k_2'}a_{k_1'} \quad (13)$$

をとる。ここでは出発点にとった軌道 $\boldsymbol{k}$ については，何の制限もないことを注意しておく。粒子の総数が N のとき，このハミルトニアンの基底状態の波動関数として

$$\boldsymbol{\Phi}=a_{k_1}{}^\dagger\cdots a_{k_N}{}^\dagger|0\rangle \quad (14)$$

をとり，

$$W=(\boldsymbol{\Phi}|H|\boldsymbol{\Phi}) \quad (15)$$

を最小にすることを考える。ところが(15)の W を計算すれば

$$W=\sum_{i=1}^{N}(k_i|h|k_i)+\frac{1}{2}\sum_{i,j=1}^{N}\sum^{N}\{(k_ik_j|v|k_ik_j)-(k_ik_j|v|k_jk_i)\} \quad (16)$$

となり，(4) がすぐに得られる。したがってこれを最小にする軌道は (11) できまり，この軌道のエネルギーの低い方から順番に N 個の電子をつめてゆけばよいことは前と全く同じである。

Hartree-Fock 近似におけるハミルトニアン　さて上の場合，ハミルトニアン H はどのような形になるかを調べる。それには(14)で粒子によって占められている軌道に対しては，生成演算子と消滅演算子の役割を逆にして，

$$a_{k_i}{}^\dagger=b_{k_i},\qquad a_{k_i}=b_{k_i}{}^\dagger,\qquad \{b_{k_i},\ b_{k_j}{}^\dagger\}=\delta_{ij} \quad (17)$$

と書くことにする。つまり $b_k{}^\dagger$, b_k は状態 $\boldsymbol{\Phi}$ において粒子によって占められている軌道 $\boldsymbol{k}$ に孔をつくったり，消したりする演算子である。以下では粒子の占めている軌道を $\boldsymbol{k}\leq\boldsymbol{k}_{\mathrm{F}}$，占めていない軌道に対しては $\boldsymbol{k}>\boldsymbol{k}_{\mathrm{F}}$ と書いて区列することにすると

$$a_k\boldsymbol{\Phi}=0 \quad (k>k_{\mathrm{F}}),\qquad\qquad b_k\boldsymbol{\Phi}=0 \quad (k\leq k_{\mathrm{F}}) \quad (18)$$

である。つまり $\boldsymbol{\Phi}$ は a, b という演算子に対しては真空と同じ働きをしている。(17)を使ってハミルトニアン(13)を書き表わし，すべての項を生成演算子は消滅演算子より左にくるように交換関係を使って書き直す。こういう表わし方を **N 積**(normal product)とよんでいる。たとえば第一項は

$$\sum_{k,k'}(k|h|k')a_k{}^\dagger a_{k'}=\sum_{k,k'>k_F}(k|h|k')a_k{}^\dagger a_{k'}+\sum_{k>k_F\geq k'}(k|h|k')a_k{}^\dagger b_{k'}{}^\dagger$$
$$+\sum_{k'>k_F\geq k}(k|h|k')b_k a_{k'}+\sum_{k_F\geq k,k'}(k|h|k')b_k b_{k'}{}^\dagger$$

となるが，最後の項を $b_k b_{k'}{}^\dagger=\delta_{kk'}-b_{k'}{}^\dagger b_k$ を使って N 積にすると

$$\sum_{k,k'}(k|h|k')a_k{}^\dagger a_{k'}=\sum_{k\leq k_F}(k|h|k)+\sum_{k,k'}(k|h|k')\{a_k{}^\dagger a_{k'}-b_{k'}{}^\dagger b_k+a_k{}^\dagger b_{k'}{}^\dagger+b_k a_{k'}\} \tag{19}$$

となる。ただし最後の項の和では，a, $a^\dagger$ についている k は $k>k_F$ で，b, $b^\dagger$ についている k は $k\leq k_F$ であると理解しておく。

同じことを相互作用の項についても行なうと，次のように16個のタイプに分かれる。

$a^\dagger\, a^\dagger\, b^\dagger\, b^\dagger$	$a^\dagger\, a^\dagger\, b^\dagger\, a$	$a^\dagger\, a^\dagger\, a\;\; a$	$a^\dagger\, b\;\; a\;\; a$	$b\;\; b\;\; a\;\; a$
	$a^\dagger\, a^\dagger\, a\;\; b^\dagger$	$\bullet a^\dagger\, b\;\; b^\dagger\, a$	$b\;\; a^\dagger\, a\;\; a$	
	$\bullet a^\dagger\, b\;\; b^\dagger\, b^\dagger$	$\bullet b\;\; a^\dagger\, b^\dagger\, a$	$\bullet b\;\; b\;\; b^\dagger\, a$	
	$\bullet b\;\; a^\dagger\, b^\dagger\, b^\dagger$	$\bullet a^\dagger\, b\;\; a\;\; b^\dagger$	$\bullet b\;\; b\;\; a\;\; b^\dagger$	
		$\bullet b\;\; a^\dagger\, a\;\; b^\dagger$		
		$\bullet b\;\; b\;\; b^\dagger\, b^\dagger$		

以上の中で N 積に直すとき，おつりの出る項に・印をつけておいた。たとえば真ん中の列の最後の項に対しては次のようになる。

$$\begin{aligned}b_1b_2b_3{}^\dagger b_4{}^\dagger&=b_1(\delta_{23}-b_3{}^\dagger b_2)b_4{}^\dagger\\&=\delta_{23}(\delta_{14}-b_4{}^\dagger b_1)-(\delta_{13}-b_3{}^\dagger b_1)(\delta_{24}-b_4{}^\dagger b_2)\\&=\delta_{14}\delta_{23}-\delta_{13}\delta_{24}-\delta_{23}b_4{}^\dagger b_1+\delta_{13}b_4{}^\dagger b_2+\delta_{24}b_3{}^\dagger b_1-b_3{}^\dagger(\delta_{14}-b_4{}^\dagger b_1)b_2\\&=\delta_{14}\delta_{23}-\delta_{13}\delta_{24}+\delta_{13}b_4{}^\dagger b_2+\delta_{24}b_3{}^\dagger b_1-\delta_{14}b_3{}^\dagger b_2-\delta_{23}b_4{}^\dagger b_1+b_3{}^\dagger b_4{}^\dagger b_1 b_2\end{aligned}$$

他の項に対しても同様な手続きを行ない，まとめると，ハミルトニアンは次のような形になる。

$$H=\sum_k(k|h|k)+\sum_{k,k'<k_F}\{(kk'|v|kk')-(kk'|v|k'k)\} \tag{20 a}$$

$$+\sum_{k,k'}(a_k{}^\dagger a_{k'}-b_{k'}{}^\dagger b_k)\Big[(k|h|k')+\sum_{k_1<k_F}\{(kk_1|v|k'k_1)-(kk_1|v|k_1k')\}\Big] \tag{20 b}$$

$$+\sum_{k,k'}(a_k{}^\dagger b_{k'}{}^\dagger+b_k a_{k'})\Big[(k|h|k')+\sum_{k_1<k_F}\{(kk_1|v|k'k_1)-(kk_1|v|k_1k')\}\Big] \tag{20 c}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{1,2,3,4}[(12|v|34)a_1{}^\dagger a_2{}^\dagger b_4{}^\dagger b_3{}^\dagger$$
$$+\{(12|v|34)-(12|v|43)\}(a_1{}^\dagger a_2{}^\dagger b_4{}^\dagger a_3+a_1{}^\dagger b_4{}^\dagger b_3{}^\dagger b_2)$$

$$+(1\,2|v|3\,4)(a_1{}^\dagger a_2{}^\dagger a_4 a_3+b_4{}^\dagger b_3{}^\dagger b_1 b_2)$$
$$-2\{(1\,2|v|3\,4)-(1\,2|v|4\,3)\}a_1{}^\dagger b_4{}^\dagger b_2 a_3$$
$$+\{(1\,2|v|3\,4)-(1\,2|v|4\,3)\}(a_1{}^\dagger b_2 a_4 a_3+b_4{}^\dagger b_1 b_2 a_3)$$
$$+(1\,2|v|3\,4)b_1 b_2 a_4 a_3] \tag{20 d}$$

ところで，(20 b)と(20 c)の［ ］内は，(8)の1体のハミルトニアンの $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}'$ 行列要素であることがすぐにわかる。したがって各軌道を(11)のように選べば $\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{k}'$ のときは0になり，$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'$ のときは(11)の $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ を与えることがわかる。(20 c)では $\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{k}'$ とは異なるはずであるから，常に0である。さらに(20 a)の定数項は(16)または(4)の基底状態 $\boldsymbol{\Phi}$ のエネルギー W にほかならない。こうして

$$H=W+\sum_{k}\epsilon_k(a_k{}^\dagger a_k-b_k{}^\dagger b_k)+H_2 \tag{21}$$

という形になる。H_2 は演算子を4個含んだ相互作用の項で，(20 d)で与えられている。

(21)のように，ハミルトニアンをN積で表わしたとき，演算子を2個含んだ項（1体のエネルギー）は対角化されていることが，Hartree-Fock 近似の大きな特徴である。つまり(21)より

$$H\boldsymbol{\Phi}=W\boldsymbol{\Phi}+H_2\boldsymbol{\Phi} \tag{22}$$

であるが，(20 d)より

$$H_2\boldsymbol{\Phi}=\frac{1}{2}\sum_{1,2,3,4}(1\,2|v|3\,4)a_1{}^\dagger a_2{}^\dagger b_4{}^\dagger b_3{}^\dagger\boldsymbol{\Phi} \tag{23}$$

であり，$\boldsymbol{\Phi}$ で占められている軌道に孔を2個つくり，占められていない軌道に粒子を2個つくった状態，つまり2個の粒子が軌道を変えた状態の和から成っている。したがって Hartree-Fock よりもよい近似に進むためには，まずこの項を考えなければならないことになる。

4-3 有限温度における Hartree-Fock 近似

3-4で述べた有限温度（熱い）における変分法を用いて，前節までの Hartree-Fock 近似を有限温度に拡張する。この場合，自由エネルギーとして

$$\begin{aligned} F_1&=\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H_1}(H-H_1)]/Z_1-k_{\mathrm{B}}T\log Z_1 \\ Z_1&=\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H_1}] \end{aligned} \tag{24}$$

という形をとり，H_1 について変分をとる。以下では大きな状態和を用い

ることにし，ハミルトニアンに $-\mu N$ を入れておくことにする。この場合は，正確にいうと(24)は自由エネルギーではなく，$p\Omega$(p：圧力，Ω：系の体積)を用いるべきであるが，以下の議論は変わらない。そこで

$$H_1=\sum_k (E_k-\mu)a_k^\dagger a_k \tag{25}$$

という形をとり，軌道 $\boldsymbol{k}$ とエネルギー E_k について変分をとり，F_1 を最小にする。

まず Z_1 は容易に計算でき

$$Z_1=\prod_k (1+e^{-\beta(E_k-\mu)}) \tag{26}$$

となる。次に

$$\langle A\rangle=\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H_1}A]/Z_1$$

と書くと

$$\begin{aligned}\langle H_1\rangle&=\sum_k (E_k-\mu)\langle a_k^\dagger a_k\rangle\\&=\sum_k (E_k-\mu)f_k\end{aligned} \tag{27}$$

となることがすぐわかる。ただし f_k は Fermi の分布関数で

$$f_k=f(E_k)=1/(e^{\beta(E_k-\mu)}+1) \tag{28}$$

で与えられる。化学ポテンシャル μ は

$$\sum_k f_k=N$$

からきまる。次に H として(13)の形から μN を引いたものとすると

$$\begin{aligned}\langle H\rangle=&\sum_k\sum_{k'}\{(k|h|k')-\mu\delta_{kk'}\}\langle a_k^\dagger a_{k'}\rangle\\&+\frac{1}{2}\sum_{k_1,k_2}\sum_{k_1',k_2'}(k_1k_2|v|k_1'k_2')\langle a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger a_{k_2'}a_{k_1'}\rangle\end{aligned}$$

と書けるが，

$$\begin{aligned}&\langle a_k^\dagger a_{k'}\rangle=\delta_{kk'}\langle a_k^\dagger a_k\rangle=f_k\delta_{kk'}\\&\langle a_1^\dagger a_2^\dagger a_3a_4\rangle=\delta_{14}\delta_{23}\langle a_1^\dagger a_4\rangle\langle a_2^\dagger a_3\rangle-\delta_{13}\delta_{24}\langle a_1^\dagger a_3\rangle\langle a_2^\dagger a_4\rangle\\&\qquad=(\delta_{14}\delta_{23}-\delta_{13}\delta_{24})f_1f_2\end{aligned}$$

となることを使えば，

$$\langle H\rangle=\sum_k\{(k|h|k)-\mu\}f_k+\frac{1}{2}\sum_k\sum_{k'}\{(kk'|v|kk')-(kk'|v|k'k)\}f_kf_{k'} \tag{29}$$

となる。これらの結果，(26)，(27)，(29)を使うと

$$F_1=\sum_k\{(k|h|k)-E_k\}f_k+\frac{1}{2}\sum_k\sum_{k'}\{(kk'|v|kk')-(kk'|v|k'k)\}f_kf_{k'}$$
$$-k_BT\sum_k\log(1+e^{-\beta(E_k-\mu)}) \tag{30}$$

と表わされる。

Hartree-Fock 方程式　上の F_1 の E_k についての変分をとると，

$$\frac{\partial f_k}{\partial E_k}=-\beta f_k(1-f_k)$$

となることを用いて

$$\frac{\partial F_1}{\partial E_k}=-\beta f_k(1-f_k)\left[(k|h|k)-E_k+\sum_{k'}\{(kk'|v|kk')-(kk'|v|k'k)\}f_{k'}\right]$$
$$=0$$

つまり

$$E_k=(k|h|k)+\sum_{k'}\{(kk'|v|kk')-(kk'|v|k'k)\}f_{k'} \tag{31}$$

が得られる。次に F_1 の $(k|=\varphi_k{}^*$ についての変分をとる。

$$(k|k')=\int\varphi_k{}^*(x)\varphi_{k'}(x)dx=\delta_{kk'}$$

という条件を考慮に入れると，

$$\frac{\delta}{\delta\varphi_k{}^*}\left\{F_1-\sum_k\sum_{k'}\lambda_{kk'}(k|k')\right\}=0$$

とすればよいから

$$h(x)\varphi_k(x)+\sum_{k'}f_{k'}\left\{\int\varphi_{k'}{}^*(x')v(x,x')\varphi_{k'}(x')dx'\varphi_k(x)\right.$$
$$\left.-\int\varphi_{k'}{}^*(x')v(x,x')\varphi_k(x')dx'\varphi_{k'}(x)\right\}=\sum_{k'}\lambda_{kk'}\varphi_{k'}(x)$$

を得る。したがって前節と同じように

$$\rho(x,x')=\sum_k f_k\varphi_k{}^*(x)\varphi_k(x') \tag{32}$$

$$A\varphi(x)=\int v(x,x')\rho(x',x)\varphi(x')dx' \tag{33}$$

という演算子を定義すれば，$\varphi_k(x)$ の方程式は

$$\left\{h(x)+\int v(x,x')\rho(x',x')dx'-A(x)\right\}\varphi_k(x)=\epsilon_k\varphi_k(x) \tag{34}$$

と，全く前と同じ式になる。(32)は有限温度における1体の密度行列で，温度を 0 K にすれば $(\beta\to\infty)$ 前の式(7)になることは明らかであろう。

φ_k が(32)を満たすとすれば，(31)の E_k は(32)の固有値 ϵ_k にほかならず，このときの F_1 は

$$F_1 = -k_\mathrm{B}T\sum_k \log(1+e^{-\beta(\epsilon_k-\mu)})$$
$$-\frac{1}{2}\sum_k\sum_{k'}\{(kk'|v|kk')-(kk'|v|k'k)\}f_k f_{k'} \qquad (35)$$

で与えられ，これも $T\to 0\,\mathrm{K}$ にすれば Hartree-Fock 近似での基底状態のエネルギー(12)になる*。

4-4 超伝導における Bogoljubov の理論 (一般化された Hartree-Fock 近似)

超伝導の BCS 理論と本質的に同等な理論が，N. N. Bogoljubov (ボゴリューボフ)** によってほぼ同じころに発表された。彼の方法は BCS と違って第二量子化の演算子を使ったもので，ふつうの Hartree-Fock 近似を拡張したものになっている。

まずハミルトニアンとしては BCS と同じ(3·25)を使い，相互作用としては(3·26)を仮定する***。つまり

$$H=\sum_{k,\sigma}\epsilon_k a_{k\sigma}{}^\dagger a_{k\sigma}-\frac{1}{2}V\sum_q{}'\sum_{\substack{k\\ \sigma}}{}'\sum_{\substack{k'\\ \sigma'}}{}' a_{k+q,\sigma}{}^\dagger a_{k'-q,\sigma'}{}^\dagger a_{k'\sigma'}a_{k\sigma} \qquad (36)$$

をとる。ただし第二項の和に $'$ をつけたのは，エネルギーが Fermi 面をはさんで ω_D 以内の範囲だけをとる意味である。

Bogoljubov 変換　上のハミルトニアンで次のような変換を行なう。

$$\begin{aligned} a_{k\uparrow} &= u_k\alpha_{k\uparrow}+v_k\alpha_{-k\downarrow}{}^\dagger \\ a_{-k\downarrow} &= u_k\alpha_{-k\downarrow}-v_k\alpha_{k\uparrow}{}^\dagger \end{aligned} \qquad (37)$$

$$u_k{}^2+v_k{}^2=1 \qquad (38)$$

この変換は****電子数を一定に保っていないが，これは BCS の波動関数(26)でも電子数が一定でないことと同じである。(37)を逆に解くと

$$\begin{aligned} \alpha_{k\uparrow} &= u_k a_{k\uparrow}-v_k a_{-k\downarrow}{}^\dagger \\ \alpha_{-k\downarrow} &= u_k a_{-k\downarrow}+v_k a_{k\uparrow}{}^\dagger \end{aligned} \qquad (39)$$

---

* ただし $-\mu N$ だけの差はある。

** N. N. Bogoljubov: Soviet Physics JETP, **7**, 41 (1958).

*** Bogoljubov はもっと基礎的なハミルトニアンから出発しているが，本質的には同じことなので，ここでは(3·25)を用いる。

**** この変換を **Bogoljubov 変換**とよんでいる。

になるが，$\{a_{\boldsymbol{k}\sigma},\ a_{\boldsymbol{k}'\sigma'}{}^\dagger\}_+=\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma\sigma'}$ から $\alpha,\ \alpha^\dagger$ も

$$\{\alpha_{\boldsymbol{k}\sigma},\ \alpha_{\boldsymbol{k}'\sigma'}{}^\dagger\}_+=\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\delta_{\sigma\sigma'} \tag{40}$$

という Fermi の変換関係を満たしていることがすぐに確かめられる。

(37)を(36)に代入し，$\alpha^\dagger,\ \alpha$ について N 積の形にする。たとえば

$$\begin{aligned}a_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}\uparrow}&=u_{\boldsymbol{k}}{}^2\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}+v_{\boldsymbol{k}}{}^2\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger-u_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}(\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger+\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow})\\&=v_{\boldsymbol{k}}{}^2+u_{\boldsymbol{k}}{}^2\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}-v_{\boldsymbol{k}}{}^2\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}-(uv)_{\boldsymbol{k}}(\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger+\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow})\end{aligned}$$

などと変形する。相互作用の項の計算はやや面倒であるが，ていねいに行なえばでき*，結果はハミルトニアン全体として

$$H=H_0+H_2+H_2'+H_4 \tag{41}$$

という形になる。ただし H_0 は定数項で

$$H_0=2\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}{}^2-V\sum_{\boldsymbol{k}}{}'\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'\{(uv)_{\boldsymbol{k}}(uv)_{\boldsymbol{k}'}+v_{\boldsymbol{k}}{}^2v_{\boldsymbol{k}'}{}^2\} \tag{42 a}$$

H_2 は $\alpha^\dagger,\ \alpha$ についての 2 次の項のうち，対角化されている部分で

$$\begin{aligned}H_2=\sum_{\boldsymbol{k}}&\left\{(u_{\boldsymbol{k}}{}^2-v_{\boldsymbol{k}}{}^2)\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}}-V\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'v_{\boldsymbol{k}'}{}^2\right)+2(uv)_{\boldsymbol{k}}V\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'(uv)_{\boldsymbol{k}'}\right\}\\&\times(\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}+\alpha_{\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}\downarrow})\end{aligned} \tag{42 b}$$

H_2' は 2 次の項の中で対角化されていないもので，次式で与えられる。

$$\begin{aligned}H_2'=\sum_{\boldsymbol{k}}&\left\{2(uv)_{\boldsymbol{k}}\left(\epsilon_{\boldsymbol{k}}-V\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'v_{\boldsymbol{k}'}{}^2\right)-(u_{\boldsymbol{k}}{}^2-v_{\boldsymbol{k}}{}^2)V\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'(uv)_{\boldsymbol{k}'}\right\}\\&\times(\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger+\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow})\end{aligned} \tag{42 c}$$

H_4 は $\alpha^\dagger,\ \alpha$ について 4 次の項で，きわめて複雑で多くの項を含んでいるが，後で必要になる項だけを取り出して書いておく。

$$\begin{aligned}H_4{}^{(0)}=-V\sum_{\boldsymbol{k}}{}'\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'&[(\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}'\uparrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}'\uparrow}\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}+\alpha_{\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}'\downarrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}'\downarrow}\alpha_{\boldsymbol{k}\downarrow})\{(uv)_{\boldsymbol{k}}(uv)_{\boldsymbol{k}'}-u_{\boldsymbol{k}}{}^2v_{\boldsymbol{k}'}{}^2\}\\&+\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}'\downarrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}'\downarrow}\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}\{u_{\boldsymbol{k}}{}^2u_{\boldsymbol{k}'}{}^2+v_{\boldsymbol{k}}{}^2v_{\boldsymbol{k}'}{}^2+2(uv)_{\boldsymbol{k}}(uv)_{\boldsymbol{k}'}\}\\&+\{\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger(\alpha_{\boldsymbol{k}'\uparrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}'\uparrow}+\alpha_{\boldsymbol{k}'\downarrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}'\downarrow})+\mathrm{h.\,c.}\}\\&\times\{(uv)_{\boldsymbol{k}}(u_{\boldsymbol{k}'}{}^2-v_{\boldsymbol{k}'}{}^2)-(u_{\boldsymbol{k}}{}^2-v_{\boldsymbol{k}}{}^2)(uv)_{\boldsymbol{k}'}\}]\end{aligned} \tag{43}$$

ただし h. c. はその前にある演算子の Hermite 共役な演算子の意味である**。H_4 の残りの項は，どの 2 個の $\alpha^\dagger\alpha$ をとっても同じ添字のもの(対角項)がないもので，たとえば $\alpha_1{}^\dagger\alpha_2{}^\dagger\alpha_3\alpha_4$ という項では，(1, 2) と (3, 4) とに同じものがないような項である。

---

* 以下の結果は，ハミルトニアン (26) の第二項で，$\sigma=\uparrow$，$\sigma'=\downarrow$ または $\sigma=\downarrow$，$\sigma'=\downarrow$，かつ $k'=-k$ になるもの (BCS の計算で残るもの)，または $\boldsymbol{q}=0$ または $\boldsymbol{k}'=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$ になるものだけをとって計算したときと同じである。

** この式の場合は $(\alpha_{\boldsymbol{k}'\uparrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}'\uparrow}+\alpha_{\boldsymbol{k}'\downarrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}'\downarrow})\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}$ である。

基底状態　基底状態は，α についての真空の状態 $|0\rangle$，つまり

$$\alpha_{k\sigma}|0\rangle=0$$

であるとして，そのエネルギー期待値を計算すると，H は α について N 積で書いたので，残るのは H_0 だけである。

$$W_0=\langle 0|H|0\rangle=H_0 \tag{44}$$

そこでこれを最小にする u_k, v_k をつくると，(38) という関係を考慮して $\partial H_0/\partial v_k=0$ を計算すると

$$2\left(\epsilon_k-V\sum_{k'}{}'v_{k'}^2\right)v_k-\left(u_k-\frac{v_k^2}{u_k}\right)V\sum_{k'}{}'(uv)_{k'}=0$$

つまり

$$2(uv)_k\left(\epsilon_k-V\sum_{k'}{}'v_{k'}^2\right)=(u_k^2-v_k^2)V\sum_{k'}{}'(uv)_{k'} \tag{45}$$

を得る。ところが (45) は (42 c) の $H_2'=0$ という条件にほかならず，これは **4-2** で述べたように，Hartree-Fock 近似では 2 次の項の非対角項が 0 になることを再確認したことにすぎない。この $\alpha^\dagger$, α についての Hartree-Fock 近似は，第二量子化の方法を使わなければできないものであり，粒子数が保存されていないので，一般化された Hartree-Fock 近似とよばれている。

(45) は BCS の方程式 (3・31), (3・32) と比べれば，ϵ_k のかわりに $\epsilon_k'=\epsilon_k-V\sum_{k'}{}'v_{k'}^2$ が現われているだけで，後は全く同じである。この余分な項は BCS でも小さいものとして無視しており，この方法は BCS と全く同等であることがわかる。これを無視すれば，(45) の解は (3・33), (3・34) と同じで

$$\begin{aligned} u_k^2&=\frac{1}{2}\left(1+\frac{\epsilon_k}{E_k}\right), & v_k^2&=\frac{1}{2}\left(1-\frac{\epsilon_k}{E_k}\right) \\ E_k&=(\epsilon_k^2+\Delta_0^2)^{1/2}, & \Delta_0&=V\sum_k{}'(uv)_k \end{aligned} \tag{46}$$

で与えられる。(46) を (42 b) に代入すると，ハミルトニアンの H_0+H_2 という項は

$$H_0+H_2=W_0+\sum_k E_k(\alpha_{k\uparrow}{}^\dagger\alpha_{k\uparrow}+\alpha_{k\downarrow}{}^\dagger\alpha_{k\downarrow}) \tag{47}$$

となることが容易に確かめられる。W_0 は BCS の基底状態のエネルギーと全く同じである。

こうして BCS 理論はハミルトニアン形式で書き直され，いろいろな物

理量は(37)の Bogoljubov 変換によって $\alpha^\dagger$, α で書き表わすことができるので，計算も形式的にできることになる。

有限温度 4–3 の方法を使って有限温度における超伝導体のふるまいを調べる。Bogoljubov 変換(37)を使って $\alpha^\dagger$, α を定義し，(25)のハミルトニアンとして

$$H_1=\sum_{\boldsymbol{k}} E_{\boldsymbol{k}}(\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}+\alpha_{\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}\downarrow}) \tag{48}$$

ととる。そして(24)の F_1，つまり

$$F_1=\langle H\rangle-\langle H_1\rangle-k_{\mathrm{B}}T\log Z_1 \tag{49}$$

を最小にするように，(48) の $E_{\boldsymbol{k}}$ と(37)の $u_{\boldsymbol{k}}$, $v_{\boldsymbol{k}}$ をきめればよい。Z_1 と $\langle H_1\rangle$ の計算は 4–3 と全く同じで

$$Z_1=\prod_{\boldsymbol{k}}(1+e^{-\beta E_{\boldsymbol{k}}})^2$$

$$\langle H_1\rangle=\sum_{\boldsymbol{k}} 2E_{\boldsymbol{k}}f_{\boldsymbol{k}},\qquad f_{\boldsymbol{k}}=1/(e^{\beta E_{\boldsymbol{k}}}+1)$$

となることはすぐわかる。他方 H は $\alpha^\dagger$, α を用いると(41)のように表わされているが，$\langle H_2'\rangle=0$, $\langle H_4\rangle=\langle H_4{}^{(0)}\rangle$ であることはすぐに確かめられる。一方 $\langle H_2\rangle$ は(42 b)から

$$\langle H_2\rangle=2\sum_{\boldsymbol{k}}\left\{\epsilon_{\boldsymbol{k}}(u_{\boldsymbol{k}}{}^2-v_{\boldsymbol{k}}{}^2)+2(uv)_{\boldsymbol{k}}V{\sum_{\boldsymbol{k}'}}'(uv)_{\boldsymbol{k}'}\right\}f_{\boldsymbol{k}}$$

となり，$\langle H_4{}^{(0)}\rangle$ は(43)から

$$\begin{aligned}\langle H_4{}^{(0)}\rangle=&-V{\sum_{\boldsymbol{k}}}'{\sum_{\boldsymbol{k}'}}'[2\{(uv)_{\boldsymbol{k}}(uv)_{\boldsymbol{k}'}-u_{\boldsymbol{k}}{}^2v_{\boldsymbol{k}'}{}^2\}\\&+\{u_{\boldsymbol{k}}{}^2u_{\boldsymbol{k}'}{}^2+v_{\boldsymbol{k}}{}^2v_{\boldsymbol{k}'}{}^2+2(uv)_{\boldsymbol{k}}(uv)_{\boldsymbol{k}'}\}]f_{\boldsymbol{k}}f_{\boldsymbol{k}'}\\=&-V{\sum_{\boldsymbol{k}}}'{\sum_{\boldsymbol{k}'}}'\{4(uv)_{\boldsymbol{k}}(uv)_{\boldsymbol{k}'}+(u_{\boldsymbol{k}}{}^2-v_{\boldsymbol{k}}{}^2)(u_{\boldsymbol{k}'}{}^2-v_{\boldsymbol{k}'}{}^2)\}f_{\boldsymbol{k}}f_{\boldsymbol{k}'}\end{aligned}$$

となる。

これらの式を F_1 に代入し，まず $\partial F_1/\partial E_{\boldsymbol{k}}=0$ とおくと，(31) と同じように*

$$\begin{aligned}E_{\boldsymbol{k}}=&(u_{\boldsymbol{k}}{}^2-v_{\boldsymbol{k}}{}^2)\left\{\epsilon_{\boldsymbol{k}}-V{\sum_{\boldsymbol{k}'}}'v_{\boldsymbol{k}'}{}^2-V{\sum_{\boldsymbol{k}'}}'(u_{\boldsymbol{k}'}{}^2-v_{\boldsymbol{k}'}{}^2)f_{\boldsymbol{k}'}\right\}\\&+2(uv)_{\boldsymbol{k}}V{\sum_{\boldsymbol{k}'}}'(uv)_{\boldsymbol{k}'}(1-2f_{\boldsymbol{k}'})\end{aligned} \tag{50}$$

が得られる。次に $\partial F_1/\partial v_{\boldsymbol{k}}=0$ とおくと，(45)と同じように

---

* (31) の $(\boldsymbol{k}|h|\boldsymbol{k})$ には $\langle H_2\rangle$ の $f_{\boldsymbol{k}}$ の係数が対応し，(31) の第二項には $H_4{}^{(0)}$ の $f_{\boldsymbol{k}}$ の係数の 2 倍が対応している。

$$2(uv)_k\left\{\epsilon_k - V\sum_{k'}{}' v_{k'}{}^2 - V\sum_{k'}{}'(u_{k'}{}^2 - v_{k'}{}^2)f_{k'}\right\}$$
$$= (u_k{}^2 - v_k{}^2)V\sum_{k'}{}'(uv)_{k'}(1-2f_{k'}) \tag{51}$$

となる。前と同様に(50), (51)の左辺の括弧内で

$$V\sum_{k'}{}' v_{k'}{}^2 + V\sum_{k'}{}'(u_{k'}{}^2 - v_{k'}{}^2)f_{k'}$$

を無視すると，(51)の解は

$$u_k{}^2 = \frac{1}{2}\left(1+\frac{\epsilon_k}{E_k}\right), \qquad v_k{}^2 = \frac{1}{2}\left(1-\frac{\epsilon_k}{E_k}\right)$$
$$E_k = (\epsilon_k{}^2 + \Delta^2)^{1/2} \tag{52}$$
$$\Delta = V\sum{}'(uv)_{k'}(1-2f_{k'}) = V\sum_{k'}{}'\frac{\Delta}{2E_{k'}}(1-2f_{k'}) \tag{53}$$

となる。基底状態との差は，(53)の右辺の和に $(1-2f_{k'})$ が入っていることで，これが重大な役目をする。また(50)の E_k が(52)と一致することも簡単に示される。

さて Δ をきめる式（**ギャップ方程式**）(53)について調べる。前と同じように状態密度を Fermi 面での値 $\rho(0)$ で近似すると，(53)は

$$\frac{1}{\rho(0)V} = \int_0^{\omega_D}\frac{1}{(\epsilon^2+\Delta^2)^{1/2}}\tanh\left\{\frac{1}{2}\beta(\epsilon^2+\Delta^2)^{1/2}\right\} \tag{54}$$

となる。(54)からきまる Δ は，β つまり温度 T によって変化する。右辺の

$$\tanh\left\{\frac{1}{2}\beta(\epsilon^2+\Delta^2)^{1/2}\right\}$$

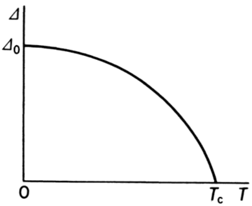
は，T がふえると減少するため，(54)からきまる Δ は温度が上がると単調に減少することがわかる。そしてある温度では $\Delta=0$ になり，それが超伝導の転移温度 T_c である。この T_c をきめる式は，(54)で $\Delta=0$ とおいて

$$\frac{1}{\rho(0)V} = \int_0^{\omega_D}\frac{d\epsilon}{\epsilon}\tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_BT_c}\right)$$

であることがわかる。これより T_c を求めると

$$k_BT_c = 1.14\omega_D e^{-\{1/\rho(0)V\}} \tag{55}$$

となる。$0<T<T_c$ の温度における Δ を(54)から求めると，4·1 図のように $T=0$ K での値 Δ_0 からだんだん減少して，T_c で 0 になるが，このとき Δ は有限の



4·1 図 エネルギー・ギャップ Δ の温度依存性

傾きで0になることがわかる。(49)の F_1 を計算し，それを温度で2回微分すれば $T<T_c$ における比熱が求まるが，$T>T_c$ に比べると T_c で Δ の微分が0でないことから，比熱に不連続が生じ，T_c で2次の相転移を示すことがわかる。

4-5 Heisenberg モデルでの分子場近似

有限温度の Hartree-Fock 近似の応用例として，**1-5** の (**d**) に述べた Heisenberg モデルで記述されるスピン系を取り扱ってみる。この系は一つの結晶格子をつくる原子がスピンをもっており，互いに隣り合った原子のスピンの間に交換相互作用が働いているもので，そのハミルトニアンは(1·73)，つまり

$$H=-2J\sum_{\langle i\cdot j\rangle}\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j \tag{56}$$

で与えられるとする。$\sum_{\langle i\cdot j\rangle}$ は i と j とが隣り合った格子点上にあるスピンについての和を表わす。(56) で表わされる系は，$J>0$ の場合は，基底状態ではすべてのスピンは一つの方向にそろって並び，強磁性状態になっている。温度が上がるとスピンのそろい方は減少し(エントロピー $\mathscr{S}$ を増大させて自由エネルギー $E-T\mathscr{S}$ を下げる)，ある温度 T_c 以上になるとスピンは全くばらばらの方向を向いてしまい，常磁性状態になる。この温度 T_c を **Curie**(キュリー)**温度**といい，ここで2次の相転移を示す。

この2次相転移を最も簡単に取り扱う近似法として，**4-3** に述べた熱い Hartree-Fock 近似を適用する。これはふつう **Weiss**(ワイス)**近似**とか，**分子場近似**とよばれるものと全く同等である。まず，(24)に用いる H_1 として

$$H_1=-\alpha\sum_{i=1}^{N}S_{iz} \tag{57}$$

という形にとり，α を変分のパラメータにする。すると $\rho_1=\exp(-\beta H_1)/Z_1$ は各スピンの積に書け，各スピンは独立に取り扱えるから，

$$\mathrm{Tr}\,[\rho_1 A]=\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H_1}A]/Z_1=\langle A\rangle$$

と書くと，

$$F_1=\langle H\rangle-\langle H_1\rangle-k_{\mathrm{B}}T\log Z_1$$

であり，

$$\langle H\rangle=-2J\frac{1}{2}Nz\langle S_z\rangle^2$$

$$\langle H_1\rangle=-\alpha N\langle S_z\rangle$$

となることがわかる。ただしスピンの総数を N, 一つの格子点に隣り合った格子点の数を z とした*。また $Z_1=\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H_1}]$ は

$$Z_1={z_0}^N$$

$$z_0=\mathrm{Tr}\,[e^{+\beta\alpha S_z}]=\sum_{S_z=-S}^{S}e^{\beta\alpha S_z}=\frac{e^{\beta\alpha(S+1)}-e^{-\beta\alpha S}}{e^{\beta\alpha}-1} \tag{58}$$

と計算できる。ただし一つのスピンの大きさを S とした。したがって自由エネルギー F_1 は

$$\frac{F_1}{N}=-Jz\langle S_z\rangle^2+\alpha\langle S_z\rangle-kT\log z_0$$

となるが,

$$\langle S_z\rangle=\sum_{S_z=-S}^{S}S_ze^{\beta\alpha S_z}\Big/\sum_{S_z=-S}^{S}e^{\beta\alpha S_z}=k_{\mathrm{B}}T\frac{\partial}{\partial\alpha}\log z_0 \tag{59}$$

を用いると

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}\left(\frac{F_1}{N}\right)=(-2Jz\langle S_z\rangle+\alpha)\frac{\partial\langle S_z\rangle}{\partial\alpha}=0$$

となり, α は

$$\alpha=2Jz\langle S_z\rangle \tag{60}$$

できまる。(60)の α は, 一つのスピンのまわりのスピンが平均値 $\langle S_z\rangle$ をもっているとき, 中心のスピンのもっている相互作用のエネルギーで, この α を $\mu_{\mathrm{B}}H_{\mathrm{eff}}$ (スピンが $\boldsymbol{S}$ のとき, その原子の磁気モーメントが $\mu_{\mathrm{B}}\boldsymbol{S}$ であるとした)とおいたときの H_{eff} を**分子場**とよんでいる。

(60)の $\langle S_z\rangle$ は(59), (58)を用いて計算でき

$$\langle S_z\rangle=SB_S(\beta\alpha S) \tag{61}$$

となることがわかる。ただし $B_S(x)$ は

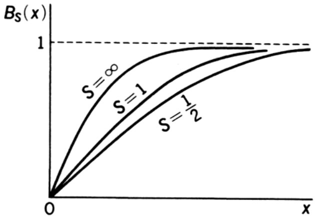
$$B_S(x)=\frac{2S+1}{2S}\coth\left(\frac{2S+1}{2S}x\right)-\frac{1}{2S}\coth\left(\frac{1}{2S}x\right) \tag{62}$$

で与えられ, **Brillouin**(ブリユアン)**関数**とよばれる。(62) の $B_S(x)$ は x が小さいときと大きいときは

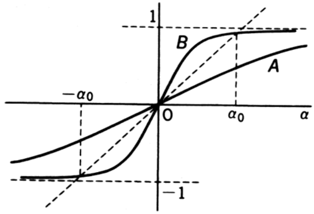
* たとえば1次元のくさりのような格子では $z=2$, 2次元の正方格子では $z=4$, 3次元の立方格子では $z=6$ である。

$$B_S(x) \sim \frac{S+1}{3S}x \qquad (x \ll 1)$$
$$\sim 1 - O(e^{-x}) \qquad (x \gg 1) \tag{63}$$

というようにふるまい，そのグラフは4·2図のようになる。



4·2 図 Brillouin 関数



4·3 図 (64)式の解
A: $T > T_c$
B: $T < T_c$

(60)は(61)を用いると

$$\alpha = 2JSzB_S(\beta S\alpha) \tag{64}$$

となる。これの両辺を α の関数としてグラフにかいてみればわかるように(4·3図)，$\beta=(k_BT)^{-1}$ が小さいうちは両辺のグラフは原点でしか交わらないが，β が大きくなると原点の他に $\alpha_0, -\alpha_0$ の2個所で交わる。そしてこの場合 $\alpha=0$ は自由エネルギー F_1 の極大に対応し，$\alpha=\pm\alpha_0$ のとき F_1 は極小になることが2次微分を調べればすぐにわかる*。つまり温度が高いときは $\alpha=0$ であり，温度が低くなると0でない α が実現される。(60)からわかるように，$\langle S_z \rangle$ は α に比例しているから，このことは十分低温では $\langle S_z \rangle \neq 0$，つまりスピンはある程度そろって強磁性状態になっている。この $\langle S_z \rangle \neq 0$ が実現される温度，つまり Curie 温度 T_c は，(64)の右辺の原点における傾きが1をこす温度であることがわかる。(63)を使うと T_c は次式で与えられることがわかる。

$$kT_c = \frac{2}{3}S(S+1)Jz \tag{65}$$

---

* このことは2次微分を調べなくてもすぐにわかる。自由エネルギー F_1 を α の関数と考えると，$\alpha \to \pm\infty$ では F_1 は十分大きいはずである。(60)が三つの解 $0, \pm\alpha_0$ をもつということはそこで $\partial F_1/\partial\alpha=0$ になることであるが，$\pm\infty$ から α の絶対値が減少するとき，最初に $\partial F_1/\partial\alpha=0$ になる所は極小になるはずである。そして真ん中の $\alpha=0$ は極大になっているはずである。

4-6 Bose 粒子系における Hartree-Fock 近似

Hartree-Fock 近似はふつう Fermi 系に対して使われているが，同等な近似は Bose 粒子系に対しても使われる。まず相互作用のある Bose 粒子系のハミルトニアンを

$$H=\sum_{k}\epsilon_k a_k{}^\dagger a_k+\frac{1}{2}\sum_q\sum_k\sum_{k'}V_q a_{k+q}{}^\dagger a_{k'-q}{}^\dagger a_{k'}a_k \tag{66}$$

と書く。ただし $a^\dagger$, a は交換関係(2·15)を満たす Bose 粒子に対する生成，消滅演算子であり，ϵ_k は運動エネルギー，V_q は相互作用の Fourier 成分(これはすべて有限であるとしておく)である。この系で Bose 凝縮がおきている場合には，$\boldsymbol{k}=0$ の状態は $\boldsymbol{k}\neq 0$ の状態と本質的に異なる役目をする。そこで(66)で $a_0{}^\dagger$, a_0 を $a_k{}^\dagger$, $a_k(\boldsymbol{k}\neq 0)$ と区別して書く。

$$\begin{aligned}H=&\sum_k{}'\epsilon_k a_k{}^\dagger a_k+\frac{1}{2}V_0 a_0{}^\dagger a_0{}^\dagger a_0 a_0\\&+\frac{1}{2}\sum_k{}'V_k(a_k{}^\dagger a_{-k}{}^\dagger a_0 a_0+a_0{}^\dagger a_0{}^\dagger a_k a_{-k}+2a_k{}^\dagger a_k a_0{}^\dagger a_0)\\&+V_0 a_0{}^\dagger a_0\sum_k{}'a_k{}^\dagger a_k\\&+\sum_q{}'\sum_k{}'V_q(a_q{}^\dagger a_{k-q}{}^\dagger a_k a_0+a_0{}^\dagger a_k{}^\dagger a_{k-q}a_q)\\&+\frac{1}{2}\sum_q{}'\sum_k{}'\sum_{k'}{}'V_q a_{k+q}{}^\dagger a_{k'-q}{}^\dagger a_{k'}a_k\end{aligned} \tag{67}$$

ただし $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{q}$ などについての和は，$a^\dagger$, a についている運動量がすべて 0 でないようにとる。また全粒子数 N は

$$N=a_0{}^\dagger a_0+\sum_k{}'a_k{}^\dagger a_k \tag{68}$$

と書ける。ここで(67)の $a_0{}^\dagger$, a_0 を，(68)を使って

$$a_0{}^\dagger,\ a_0\ \longrightarrow\ (N-\sum_k{}'a_k{}^\dagger a_k)^{1/2} \tag{69}$$

とおきかえることができる。これは次のように証明できる。

証明 (68)の H の固有関数を，全粒子数 N が一定であるような空間内で展開するとき，基礎にとるべき完全直交系として

$$\Psi_{N;\{\eta_k\}}=\frac{1}{(N-\sum_k\eta_k)^{1/2}}(a_0{}^\dagger)^{N-\sum_k\eta_k}\prod_k\frac{(a_k{}^\dagger)^{\eta_k}}{(\eta_k!)^{1/2}}|0) \tag{70}$$

をとることができる。ただし $|0)$ は粒子が全くない真空状態を表わす。次に $\boldsymbol{k}=0$

の粒子数は問題にしない空間で，次の完全直交系を考える。

$$\Phi_{\{\eta_k\}}=\prod_{k\neq 0}\frac{(a_k{}^\dagger)^{\eta_k}}{(\eta_k!)^{1/2}}|0) \tag{71}$$

すると(70)の Ψ と(71)の Φ は一対一に対応する。そこで(70)を用いた H の行列要素と，(71)を用いたある H' の行列要素とが一致するような H' をつくる。つまり

$$(\Psi_{N;\{\eta_k'\}},\ H\Psi_{N;\{\eta_k\}})=(\Phi_{\{\eta_k'\}},\ H'\Phi_{\{\eta_k\}})$$

になるような H' をつくる。このような H' は H の中で $a_0{}^\dagger$, a_0 を $(N-\sum\eta_k+\epsilon)^{1/2}$ でおきかえたものであることがすぐにわかる。ただし ϵ は 0, ±1, 2 のいずれかである。たとえば

$$f(a_k{}^\dagger,a_k)a_0{}^\dagger a_0 \longrightarrow f(a_k{}^\dagger,a_k)(N-\sum_k\eta_k)=f(a_k,{}^\dagger a_k)\,(N-\sum_k{}'a_k{}^\dagger a_k)$$

$$f(a_k{}^\dagger,a_k)a_0{}^2 \longrightarrow f(a_k{}^\dagger,a_k)\,\{(N-\sum_k\eta_k)(N-\sum_k\eta_k-1)\}^{1/2}$$

$$(a_0{}^\dagger)^2 f(a_k{}^\dagger,a_k) \longrightarrow \{(N-\sum_k\eta_k+1)(N-\sum_k\eta_k+2)\}^{1/2}f(a_k,a_k)$$

というようにおきかえればよい。系が Bose 凝縮をおこしているときには，

$$\langle a_0{}^\dagger a_0\rangle=N-\sum_k\eta_k\gg 1$$

であるから，±1, 2 はいずれも無視してよい。したがって H の中の $a_0{}^\dagger$, a_0 を $(N-\sum_k{}'a_k{}^\dagger a_k)^{1/2}$ でおきかえたものを H' とすることができる。(証明終わり)

(67)で(69)のおきかえをして整理すると，

$$H'=U_0+H_2+H_3+H_4 \tag{72}$$

$$U_0=\frac{1}{2}V_0N^2 \tag{72 a}$$

$$H_2=\sum_k\left\{(\epsilon_k+NV_k)a_k{}^\dagger a_k+\frac{1}{2}NV_k(a_k{}^\dagger a_{-k}{}^\dagger+a_{-k}a_k)\right\} \tag{72 b}$$

$$H_3=\frac{1}{2}\sum_k\sum_{k'}(N-\sum_k a_k{}^\dagger a_k)^{1/2}(V_k+V_{k'})(a_{k+k'}{}^\dagger a_k a_{k'}+a_k{}^\dagger a_{k'}{}^\dagger a_{k+k'}) \tag{72 c}$$

$$\begin{aligned}H_4=&\frac{1}{2}\sum_q\sum_k\sum_{k'}V_q a_{k+q}{}^\dagger a_{k'-q}{}^\dagger a_{k'}a_k\\&-\frac{1}{2}\sum_k\sum_{k'}\{(V_0+V_k+V_{k'})a_k{}^\dagger a_k a_{k'}{}^\dagger a_{k'}\\&\qquad+V_k(a_k{}^\dagger a_{-k}{}^\dagger+a_{-k}a_k)a_{k'}{}^\dagger a_{k'}\}\end{aligned} \tag{72 d}$$

となる。ただし $a_0{}^\dagger$, a_0 は(69)を使って消去したので，残っている $a^\dagger$, a は $\boldsymbol{k}\neq 0$ だけであり，和に ′ をつけないことにした。

(72 b)を見ればわかるように，$a^\dagger$, a の2次の項にはまだ非対角項 $a^\dagger a^\dagger$, aa が残っている。これを対角化するには

$$\alpha_k = u_k a_k - v_k a_{-k}^\dagger \tag{73}$$

$$u_k^2 - v_k^2 = 1 \tag{74}$$

という変換をしてやればよい。しかし(74)を(72 c, d)に代入し，$\alpha^\dagger$, α について N 積にすると，新しく $\alpha^\dagger$, α についての 2 次の項が現われる。それらを含めて整理し直すと

$$H' = U_0' + H_2' + H_3' + H_4' \tag{75}$$

$$\begin{aligned} U_0' = {} & \frac{1}{2} V_0 N^2 + \sum_k \{v_k^2(\epsilon_k + NV_k) - NV_k(uv)_k\} \\ & + \frac{1}{2}\sum_k\sum_{k'}(V_0 + V_{k-k'})v_k^2 v_{k'}^2 - \frac{1}{2}\sum_k\sum_{k'}(V_0 + V_k + V_{k'})v_k^2 v_{k'}^2 \\ & + \frac{1}{2}\sum_k\sum_{k'} V_{k-k'}(uv)_k(uv)_{k'} + \sum_k\sum_{k'} V_k(uv)_k v_{k'}^2 \end{aligned} \tag{75 a}$$

$$H_2' = \sum_k E_k \alpha_k^\dagger \alpha_k + \sum_k A_k(\alpha_k^\dagger \alpha_{-k}^\dagger + \alpha_{-k}\alpha_k) \tag{75 b}$$

$$\begin{aligned} E_k = {} & (u_k^2 + v_k^2)\{\epsilon_k + NV_k + \sum_{k'}(V_0 + V_{k-k'})v_{k'}^2 \\ & \qquad - \sum_{k'}(V_0 + V_k + V_{k'})v_{k'}^2 + \sum_{k'} V_{k'}(uv)_{k'}\} \\ & - 2(uv)_k\{NV_k - \sum_{k'} V_{k-k'}(uv)_{k'} - V_k \sum_k v_{k'}^2\} \end{aligned} \tag{76}$$

$$\begin{aligned} A_k = {} & -(uv)_k\{\epsilon_k + NV_k + \sum_{k'}(V_0 + V_{k-k'})v_{k'}^2 - \sum_{k'}(V_0 + V_k + V_{k'})v_{k'}^2 \\ & \qquad + \sum_{k'} V_{k'}(uv)_{k'}\} \\ & + \frac{1}{2}(u_k^2 + v_k^2)\{NV_k - \sum_{k'} V_{k-k'}(uv)_{k'} - V_k \sum_{k'} v_{k'}^2\} \end{aligned} \tag{77}$$

と書くことができる。H_3', H_4' は $\alpha^\dagger$, α についてそれぞれ 3 次，4 次の項であるが，ここでは省略する。

基底状態　さて基底状態として α の真空，つまり

$$\alpha_k|0\rangle = 0$$

になるような状態 $|0\rangle$ をとれば，そのエネルギー期待値は U_0' である。このエネルギー U_0' を最小にするように u_k, v_k をきめると，その条件は，

$$A_k = 0 \tag{78}$$

と一致することがわかる。つまり Fermi 系の場合と同様に，いまの場合も基底状態のエネルギーを最低にすることは，2 次の項を対角化することと同じになる。条件 (78) を u_k, v_k について最終的に解くことはむずかしいが，その形はある程度定めることができる。それには

$$K \equiv \sum_{k} v_k{}^2$$
$$I_k \equiv \sum_{k'} V_{k-k'} v_{k'}{}^2 \qquad (79)$$
$$J_k \equiv \sum_{k'} V_{k-k'} (uv)_{k'}$$

とおくと，(78)は

$$(uv)_k\{\epsilon_k+(N-K)V_k+(I_k-I_0)+J_0\}=(u_k{}^2+v_k{}^2)\{(N-K)V_k-J_k\}$$

と書け，これと(74)より，u_k, v_k は

$$u_k{}^2=\frac{1}{2}\left(\frac{f_k}{E_k}+1\right), \quad v_k{}^2=\frac{1}{2}\left(\frac{f_k}{E_k}-1\right) \qquad (80)$$

と解ける。ただし

$$f_k=\epsilon_k+(N-K)V_k+(I_k-I_0)+J_0 \qquad (81)$$

であり，E_k は(76)と一致し，

$$E_k=(f_k{}^2-g_k{}^2)^{1/2} \qquad (82)$$
$$g_k=(N-K)V_k-J_k \qquad (83)$$

で与えられる。

励起エネルギー (82)の E_k は，(75 b)からわかるようにこの近似における励起エネルギーを与えている。この励起エネルギーが $\boldsymbol{k}$ の小さい所でどうなっているかを調べてみる。(77)で $\boldsymbol{k}=0$ とおけばすぐわかるように

$$E_k \longrightarrow \{4V_0(N-K)J_0\}^{1/2} \qquad (84)$$

となり有限の値になる。これは励起エネルギーが常にある値より大きく，基底状態と励起状態の間にはエネルギー・ギャップが存在することになる*。

以上の方法は変分法に基づいており，また基底状態として1体の演算子の真空にとっているから，たしかに一般化された Hartree-Fock 近似に対応しているということができる。実はこれよりも前に，厳密な変分法ではなく，(72 b)の H_2 だけを対角化をすることは，Bogoljubov によって行なわれた**。Bogoljubov の結果は

$$u_k{}^2=\frac{1}{2}\left(\frac{\epsilon_k+NV_k}{E_k}+1\right), \quad v_k{}^2=\left(\frac{\epsilon_k+NV_k}{E_k}-1\right) \qquad (85)$$

---

* この取り扱いでエネルギー・ギャップが現われることは，M. Girardeau and R. Arnowitt: Phys. Rev. **106**, 1117, 1128 (1957), および G. Wentzel: Phys. Rev. **120**, 1572 (1960) によって指摘された。

** N. N. Bogoljubov: J. Phys. (U. S. S. R.) **9**, 23 (1947).

$$E_{\boldsymbol{k}}=\{\epsilon_{\boldsymbol{k}}(\epsilon_{\boldsymbol{k}}+2NV_{\boldsymbol{k}})\}^{1/2} \tag{86}$$

で与えられ，この $E_{\boldsymbol{k}}$ が励起エネルギーを与える。(86)の $E_{\boldsymbol{k}}$ は(82)と異なり，$\boldsymbol{k}\to 0$ のとき $|\boldsymbol{k}|$ に比例することは，$\epsilon_{\boldsymbol{k}}\propto \boldsymbol{k}^2$ であることからわかる。そしてこれが液体ヘリウムにおけるフォノンであると説明されていた。しかも $\boldsymbol{k}$ が十分大きいときは(85)の $E_{\boldsymbol{k}}$ は ほぼ $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ に等しくなり，これがロトンに対応すると考えられる。したがって Bogoljubov の近似は，液体ヘリウムの励起エネルギーをほぼ正しく与えているものと考えられていた。ところが近似をもっとよくして，基底状態のエネルギーが最低になるようにきめると，励起エネルギーにギャップが現われ，ヘリウムの説明はできなくなってしまうことになる。この点はもっと近似を上げることによって，$\boldsymbol{k}\to 0$ でフォノン・スペクトルをとり戻すことが示され*，一応解決されている。

演習問題 4.

1. 一つの軌道に上向きスピンと下向きスピンの2個の粒子が入っている場合，相互作用 v がスピン変数を含まなければ，Hartree-Fock の方程式(11)は

$$\{h(\boldsymbol{r})+2\int v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\sum_{i=1}^{N}|\varphi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r}')|^2 d\boldsymbol{r}'\}\varphi_{\boldsymbol{k}_j}(\boldsymbol{r})$$

$$-\sum_{i=1}^{N}\int v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi_{\boldsymbol{k}_i}{}^*(\boldsymbol{r}')\varphi_{\boldsymbol{k}_j}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}'\varphi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r})=\epsilon_{\boldsymbol{k}_j}\varphi_{\boldsymbol{k}_j}(\boldsymbol{r})$$

となることを示せ。

2. (62)式の $B_S(x)$ は $x\ll 1$ のとき x のべき級数に展開すると，その第一項は(63)式の $\dfrac{S+1}{3S}x$ であることを示し，さらにその次の項を求めよ。

3. (75 a)式の U_0' を $v_{\boldsymbol{k}}$ について微分して0とおくと，(77)式の $A_{\boldsymbol{k}}=0$ という式が得られることを示せ。

4. 超伝導における Bogoljubov 変換(37)式を

$$a_{\boldsymbol{k}\uparrow}=U\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}U^{-1},\qquad a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}=U\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}U^{-1}$$

となるような U の形を求めよ。

5. Bose 粒子系での Bogoljubov 変換(73)式に対しても，前問と同様な変換 U の形を求めよ。

6. 超伝導における基底状態において，全粒子数のゆらぎ

$$\langle N^2\rangle-\langle N\rangle^2$$

を計算せよ。

---

* F. Takano: Phys. Rev. **123**, 699 (1961).

5. 摂動展開

相互作用をしている多体系では，ハミルトニアンの固有値や状態和の正確な値を求めることはほとんど不可能である。このような場合によく用いられる方法が摂動計算である。これはハミルトニアン H を

$$H=H_0+H_1$$

と二つの部分に分け，H_0 としては固有値や状態和が計算できるものをとり，H_1 は H_0 に比べて小さいものと考えて，いろいろな量を H_1 のべきで展開して計算しようというものである。

ハミルトニアンの固有値，固有関数に関する摂動計算の方法は，量子力学の教科書でよく説明されているので，ここでは多体問題に特徴的なことについてだけ述べることにする。

5-1 不完全気体とビリアル展開

ここで述べる不完全気体の取り扱い方は量子力学の問題ではないが，多体問題における摂動展開の特徴を理解するのによい例題なので，簡単に説明しておく。理想気体の状態方程式は，その体積を Ω，圧力を p，絶対温度を T，分子の総数を N とすると

$$p\Omega=Nk_{\mathrm{B}}T$$

で与えられる。これは実際の気体に対して，低密度(高温，低圧)ではよく合っているが，高密度(低温，高圧)になるとずれてくる。このようなずれを示す気体を不完全気体とよび，このずれは分子間の相互作用によって生ずるものと考えられる。このずれを考慮した状態方程式がいくつか提唱さ

れ，その一つが，次の **van der Waals**(ファン・デル・ワールス) **の状態方程式**である。

$$\left(p+\frac{a}{\Omega^2}\right)(\Omega-b)=Nk_{\mathrm{B}}T \qquad (1)$$

a は分子間の引力によって壁の近くの分子が内部に引っ張られている効果を，b は分子が有限の大きさをもっているため分子が動きまわる体積が減少する効果を表わしている。この状態方程式による等温線は，低温では横 S 字形になり，気体-液体の相転移を定性的に再現している。

このような不完全気体を統計力学的に取り扱うには，量子効果を無視して，状態和として

$$Z_N=\frac{1}{N!}\int\cdots\int e^{-\beta H}d^3\boldsymbol{p}_1\cdots d^3\boldsymbol{p}_N d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N/h^{3N} \qquad (2)$$

を計算すればよい。そしてハミルトニアンとしては

$$H=\sum_{j=1}^{N}\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}_j{}^2+U(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N) \qquad (3)$$

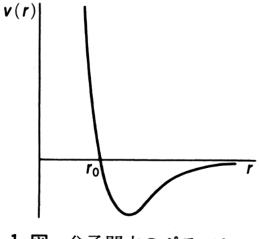
$$U(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)=\sum_{i>j}\sum v(r_{ij}) \qquad (4)$$

を考える。(2)の積分のうち，運動量に関する積分は容易に実行できて，

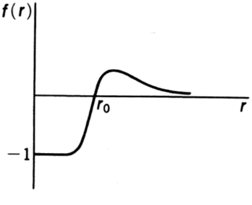
$$Z_N=\left(\frac{2\pi mk_{\mathrm{B}}T}{h^2}\right)^{3N/2}Q_N \qquad (5)$$

$$Q_N=\frac{1}{N!}\int\cdots\int e^{-\beta U}d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N \qquad (6)$$

と書ける。相互作用は(4)のように2体力の和になっており，2体力のポテンシャル $v(r)$ は一般に5·1図のような形をしている。二つの分子がかなり離れているときは引力が働いているので $v(r)$ は負であるが，分子がある程度近づくときわめて大きな反発力を受け（分子の大きさが有限であることを表わす），$v(r)$ は正になり，$r\to 0$ で $+\infty$ になる。このため v 自身



5·1 図　分子間力のポテンシャル



5·2 図　(7)式の $f(r)$ の形

の空間積分は収束しないので，次のような工夫をする。それには

$$e^{-\beta v(r_{ij})}=1+f_{ij} \tag{7}$$

と書くと，f_{ij} は5·2図に示したように r_{ij} のいかなる値に対しても有界であり，$v=0$ のとき 0 である。さらに $v(r)$ の最小値に比べて k_BT がずっと大きいときは，$|f_{ij}|$ は 1 に比べて小さいから，v のかわりに f で Q_N を展開することができる。つまり

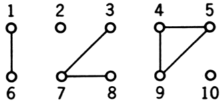
$$e^{-\beta U}=\prod_{i>j}e^{-\beta v(r_{ij})}=\prod_{i>j}(1+f_{ij})$$
$$=1+\sum_{i>j}f_{ij}+\sum_{i>j}\sum_{k>l}f_{ij}f_{kl}+\cdots$$

と展開し，これを項別に積分して Q_N を求めようというわけである。しかしこれをこのまま積分したのでは，この級数は収束しない。それは項の数が後の方ほど多くなり，第 n 項と第 $n+1$ 項の比は常に N の程度になっているからである。

クラスター積分　そこで収束する結果を得るために次のようにする。まず Q_N の一般項は

$$\int\cdots\int\prod f_{ij}d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N \tag{8}$$

という形をしているが，これをグラフで表わすことを考える。それには N 個の分子に対応した点をかき，それぞれに分子の番号をつけておく。そして (8) のような一つの項に対して，これに f_{ij} が入っていれば i 番目の分子と j 番目の分子を線分で結ぶ。すると Q_N の一つの項に対して一つの結び方が対応し，Q_N はいろいろな結び方をとって積分したものの和になっている。たとえば5·3図のような結び方に対しては



5·3 図

$$\int\cdots\int f_{16}f_{37}f_{78}f_{45}f_{49}f_{59}d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N$$

が対応する。

ところで一つのグラフでは，分子はいくつかのグループに分かれており，同じグループ内の分子は直接または間接的に結ばれているが，違うグループの分子は直接的にも間接的にも結ばれていないようになっている。たとえば図では 2, 10 はそれぞれ 1 個の分子で一つのグループをつくり，1 と 6 とは一つのグループ，3, 7, 8 と 4, 5, 9 がそれぞれ 3 分子のグループをつくっている。重要なことはそれぞれのグループにおける積分は独立

に実行できることで，このグループのことを**クラスター**(cluster) とよぶ。

このように N 個の分子をクラスターに分けたとき，同じ分け方でもいろいろな線の引き方がある。そこでクラスターへの分け方を固定しておいて，各クラスター内での線のいろいろな引き方について和をとってしまう。そしてその結果の積分を次のように定義する。つまり l 個の分子のクラスターに対して

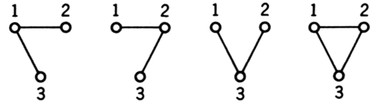
$$l!\Omega b_l=\int\cdots\int\sum(\prod_{i,j}f_{ij})d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_l \tag{9}$$

で b_l を定義する。ただし和は，l 個の分子がすべてつながっているような線の引き方全部についての和を意味する。この b_l を**クラスター積分**という。たとえば

$$b_2=\frac{1}{2!\Omega}\iint f_{12}d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2$$

$$b_3=\frac{1}{3!\Omega}\iiint(f_{12}f_{13}+f_{12}f_{23}+f_{13}f_{23}+f_{12}f_{23}f_{31})d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2d^3\boldsymbol{r}_3 \tag{10}$$

で，b_3 の中の和は，グラフで表わすと5·4図に対応している。(9)で左辺に Ω をつけたのは，右辺の積分は $(l-1)$ 分子について行なってしまえば，その結果は l 番目の分子の座標によらなくなり，これについての積分が体積 Ω を与えるからである。つまり(9)のように定義しておけば，b_l は示強変数になっている*。



5·4 図 3分子のクラスター積分

クラスター展開 さて N 個の分子を，1分子のクラスター m_1 個，2分子のクラスター m_2 個，$\cdots$，l 分子のクラスター m_l 個，$\cdots$ というように分けたとする。もちろん $\sum_l lm_l=N$ である。このときどの分子がどのクラスターに属しているかは関係なく，積分は

$$\prod_l(l!\Omega b_l)^{m_l}$$

を与える。そこで N 個の分子をこのように分ける分け方の数

$$\frac{N!}{\prod_l\{(l!)^{m_l}m_l!\}}$$

を掛けて，あらゆる m_l の取り方について和をとれば，それが Q_N になる。

* ただし表面効果は無視する。

つまり

$$Q_N=\frac{1}{N!}\sum_{\substack{\{m_l\}\\(\Sigma lm_l=N)}}\frac{N!}{\prod_l\{(l!)^{m_l}m_l!\}}\prod(l!\Omega b_l)^{m_l}$$
$$=\sum_{\substack{\{m_l\}\\(\Sigma lm_l=N)}}\prod_l\left\{\frac{(\Omega b_l)^{m_l}}{m_l!}\right\} \tag{11}$$

となる。(11)の和は $\sum_l lm_l=N$ という条件の下で，あらゆる m_l の取り方についてとるのであるが，この条件があるため計算できない。そこで Z_N のかわりに大きな状態和

$$\Xi=\sum_{N=0}^{\infty}e^{N\mu/k_BT}Z_N$$

を計算することにする。μ は化学ポテンシャルである。(5)を Z_N に代入し

$$z=e^{\mu/k_BT}\left(\frac{2\pi mk_BT}{h^2}\right)^{3/2} \tag{12}$$

とおけば

$$\Xi=\sum_{N=0}^{\infty}\sum_{\substack{\{m_l\}\\(\Sigma lm_l=N)}}\prod_l\frac{(z^l\Omega b_l)^{m_l}}{m_l!}$$

となるが，N の和は実は $\sum_l lm_l=N$ という制限がいらないことと同等である。したがって

$$\Xi=\sum_{m_1=0}^{\infty}\sum_{m_2=0}^{\infty}\cdots\sum_{m_l=0}^{\infty}\cdots\prod_l\frac{(z^l\Omega b_l)^{m_l}}{m_l!}$$
$$=\prod_l\sum_{m_l=0}^{\infty}\frac{1}{m_l!}(z^l\Omega b_l)^{m_l}=\exp\{\Omega\sum_l b_lz^l\} \tag{13}$$

となることがわかる。Ξ は $\exp(p\Omega/k_BT)$ に等しいから，(13)から状態方程式がすぐに求まる*。

$$\frac{p}{k_BT}=\sum_l b_lz^l \tag{14}$$

ただし z は全分子数が N という条件から定まる。つまり

$$N=\frac{\partial\log\Xi}{\partial\mu}=z\frac{\partial\log\Xi}{\partial z}$$

より

$$\frac{N}{\Omega}=\sum_l lb_lz^l \tag{15}$$

* この形をクラスター展開とよぶ。

が z をきめる式である。(14)と(15)が z を媒介変数とした状態方程式である。

ビリアル展開　(14)，(15)から z を消去することは一般にはできない。しかし低密度のとき，つまり N/Ω が小さいときには，z を N/Ω のべき級数で表わすことができる。初めの2項までを求めると

$$z=\frac{N}{\Omega}-2b_2\left(\frac{N}{\Omega}\right)^2+\cdots$$

となり，これを(13)に入れると

$$\frac{p}{k_BT}=\frac{N}{\Omega}\left(1-b_2\frac{N}{\Omega}+\cdots\right) \tag{16}$$

となり，これは p/k_BT を $1/\Omega$ で展開した形になっている。この展開を，**ビリアル**(virial)**展開**といい，$1/\Omega$ の係数を**第二ビリアル係数**，$1/\Omega^2$ の係数を**第三ビリアル係数**などという。

(16)の第二ビリアル係数 $-Nb_2$ は簡単な形に書ける。(10)の b_2 の積分は，$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_1$ を独立変数にとれば，前にも述べたように $\boldsymbol{r}_1$ の積分は体積 Ω を与えるので

$$b_2=2\pi\int_0^\infty f(r)\,r^2dr \tag{17}$$

となる。ただし f は $\boldsymbol{r}$ の方向によらないことを用いた。したがって第二ビリアル係数〔これを $B(T)$ と書く〕は

$$B(T)=2\pi N\int_0^\infty (1-e^{-v(r)/k_BT})\,r^2dr \tag{18}$$

と表わされる。$f(r)$ は5·2図に示したように，$r<r_0$ ではほぼ -1 に等しく，$r>r_0$ では正できわめて小さい。そこで $f(r)$ として次のように近似する。

$$f(r)=e^{-v(r)/k_BT}-1\sim\begin{cases}-1 & (r<r_0)\\ -\dfrac{v(r)}{k_BT} & (r\geq r_0)\end{cases}$$

すると(18)の積分は実行できて

$$B(T)=N\frac{2\pi}{3}r_0{}^3-\frac{2\pi N}{k_BT}\int_{r_0}^\infty v(r)\,r^2dr \tag{19}$$

となる。つまり十分高温では第二ビリアル係数 $B(T)$ は，温度によらない項と，温度に逆比例する項の和になっている。そして最初の項は分子間の反発力によって生じ，後の項は引力から生じていることが上の議論からわかる。このことは実は van der Waals の状態方程式の一つの基礎づけに

なっている。van der Waals の状態方程式(1)を(16)の形に書くと，第二ビリアル係数は

$$B(T)=b-\frac{a}{k_BT} \tag{19'}$$

で与えられることがすぐわかる。(19′)は(19)と同じ形をしており，

$$b=N\frac{2\pi}{3}r_0^3, \qquad a=2\pi N\int_{r_0}^{\infty}v(r)r^2dr$$

という対応づけができ，たしかに b は反発力，a は引力の効果を表わしている。

クラスター展開は Mayer(メイヤー)，Urcell(アーセル) 展開ともよばれており，気体の凝縮の議論にまで使われたものである。彼らは，クラスター積分 b_l をできるだけ簡単化し，(14)や (15) の収束性から凝縮を論じたが，その議論はかなり複雑であり，またこの本の目的からはずれるので，ここでは省略する*。ただ上に述べた話は，グラフを使ったものとしては物理学では最初のものであることをつけ加えておく。

5-2 量子力学におけるいろいろな表示

これまでは，系の波動関数 $\psi(t)$ は Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi \tag{20}$$

に従って変化すると考えてきた。したがって時刻 t_0 の波動関数 $\psi(t_0)$ と時刻 t の波動関数 $\psi(t)$ は

$$\psi(t)=e^{-iH(t-t_0)/\hbar}\psi(t_0) \tag{21}$$

という関係で結ばれている。このように系の波動関数が時刻 t とともに変化するという考え方を **Schrödinger 表示**とよぶ。この表示では任意の物理量の時刻 t における期待値は，この物理量を表わす演算子を A とすると

$$\langle A\rangle(t)=(\psi(t),\ A\psi(t)) \tag{22}$$

で与えられる。(21)で $t_0=0$ として(22)に代入すると

$$\langle A\rangle(t)=(\psi(0),\ e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar}\psi(0)) \tag{23}$$

となる。

---

* この話は J. E. Mayer and M. G. Mayer: Statistical Mechanics (John Wiley & Sons, 1940) に詳しく解説されている。

これに対し，波動関数 ψ(状態) は時間に対して変化せず，演算子 (物理量)が変化するという見方を **Heisenberg 表示**という。この表示での波動関数や演算子には H をつけて Schrödinger 表示と区別することにすると，二つの表示における波動関数と演算子は次の関係を満たしている。

$$\begin{aligned}\psi_{\mathrm{H}}&=e^{iHt/\hbar}\psi\\ A_{\mathrm{H}}&=e^{iHt/\hbar}Ae^{-iHt/\hbar}\end{aligned}\tag{24}$$

ただし $t=0$ で両方の表示が一致するものとした。(24)より

$$\frac{\partial\psi_{\mathrm{H}}}{\partial t}=0, \qquad i\hbar\frac{\partial A_{\mathrm{H}}}{\partial t}=[A_{\mathrm{H}},\ H]\tag{25}$$

であることは明らかである。

もう一つ便利な表示に**相互作用表示**がある。これは Schrödinger 表示と Heisenberg 表示の中間ともいうべきもので，ハミルトニアン H が

$$H=H_0+H_1$$

と二つの部分に分かれ，H_0 の下での運動は正確に求められる場合に便利である。H_0 が独立粒子の運動を表わし，H_1 が粒子間の相互作用を表わす場合が多いので，相互作用表示の名前がある。

相互作用表示の波動関数，演算子を ψ_{I}，A_{I} と書くと，これらは

$$\begin{aligned}\psi_{\mathrm{I}}(t)&=e^{iH_0t/\hbar}\psi(t)=e^{iH_0t/\hbar}e^{-iHt/\hbar}\psi_{\mathrm{H}}\\ A_{\mathrm{I}}(t)&=e^{iH_0t/\hbar}Ae^{-iH_0t/\hbar}=e^{iH_0t/\hbar}e^{-iHt/\hbar}A_{\mathrm{H}}e^{iHt/\hbar}e^{-iH_0t/\hbar}\end{aligned}\tag{26}$$

で定義される。これらの時間変化は

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\psi_{\mathrm{I}}(t)}{\partial t}&=(H_1)_{\mathrm{I}}(t)\psi_{\mathrm{I}}(t)\\ i\hbar\frac{\partial A_{\mathrm{I}}(t)}{\partial t}&=[A_{\mathrm{I}}(t),\ H_0]\end{aligned}\tag{27}$$

で与えられることは，(25)からすぐにわかる。

(26)または(27)からわかるように，相互作用表示では波動関数(状態)は相互作用 H_1 のために変化し，演算子(物理量)は H_0 に従って運動する。いいかえると H_0 で動く座標系で運動を考えることに対応する。そして相互作用がないときは，Heisenberg 表示に一致する。たとえば

$$H_0=\sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k\tag{28}$$

と書ける場合は，これが Fermi 系であろうと Bose 系であろうと

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}a_{k\mathrm{I}}(t)=\epsilon_k a_{k\mathrm{I}}(t)$$

が成り立ち，これを積分して

$$a_{k\mathrm{I}}(t)\,e^{-i\epsilon_k t/\hbar}a_k(0)=e^{-i\epsilon_k t/\hbar}a_k \tag{29}$$

が得られる。同様にして

$$a_{k\mathrm{I}}{}^{\dagger}(t)=e^{i\epsilon_k t/\hbar}a_k \tag{29'}$$

である。

5-3 相互作用表示における変換関数

相互作用表示は後でよく使うので，ここでもう少し詳しく議論しておく。この表示での二つの時刻 t_0, t における波動関数は次のような関係にあることが(26)と(21)からわかる。

$$\psi_{\mathrm{I}}(t)=U(t,t_0)\psi_{\mathrm{I}}(t_0) \tag{30}$$

$$U(t,t_0)=e^{iH_0t/\hbar}e^{-iH(t-t_0)/\hbar}e^{-iH_0t_0/\hbar} \tag{31}$$

この $U(t,t_0)$ を**変換関数**とよぶが，これは次のような性質をもっている。

i) $$U(t_0,t_0)=1$$

ii) $U(t,t_0)$ はユニタリー演算子である。つまり

$$U^{\dagger}(t,t_0)=U^{-1}(t,t_0)$$

iii) $$U(t_1,t_3)\,U(t_3,t_2)=U(t_1,t_2)$$

したがって

$$U(t,t_0)\,U(t_0,t)=1$$

ii) と組み合わせると

$$U^{\dagger}(t,t_0)=U(t_0,t)$$

iv) $$i\hbar\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t}=H_1(t)\,U(t,t_0) \tag{32}$$

ただしこれから先は $(H_1)_{\mathrm{I}}(t)$ を単に $H_1(t)$ と書くことにする。これらの性質はすべて定義式(31)から容易に導出できる。(32)を形式的に解いて積分方程式の形にすると

$$U(t,t_0)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'H_1(t')\,U(t',t_0) \tag{33}$$

になる。ただし上の性質 i)を用いた。(33)から逐次近似によって $U(t,t_0)$ を H_1 のべき級数の形に書くことができる。

$$U(t,t_0)=1+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t}dt_1H_1(t_1)+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t}dt_2H_1(t_1)\,H_1(t_2)+\cdots$$

$$\cdots+\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_nH_1(t_1)\cdots H_1(t_n)+\cdots \tag{34}$$

ここで $H_1(t)$ と $H_1(t')$ は $t \neq t'$ のときは必ずしも可換でないこと，また一般項での積分範囲は $t>t_1>t_2>\cdots>t_{n-1}>t_n>t_0$ になっていることに注意してほしい。

(34)の積分をもっと対称的な形に書くために，まず

$$\theta(x)=\begin{cases}1 & (x\geqq 0)\\ 0 & (x<0)\end{cases} \tag{35}$$

という**階段関数**を定義し，これを使って時間についての**順序づけの演算子** T を次のように定義し，これを簡単に **T 積**とよぶことにする。

$$\mathrm{T}[A(t)B(t')]=A(t)B(t')\theta(t-t')\pm B(t')A(t)\theta(t'-t) \tag{36}$$

ただし演算子 $A(t)$, $B(t')$ は相互作用表示または Heisenberg 表示のどちらでもよい。また ± は A, B が Bose 型の演算子のときは +， Fermi 型のときは − をとるものとする*。演算子の数が 3 個以上のときも同じように定義する。この T 積を使えば，(34)は

$$U(t,t_0)=1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\cdots\int_{t_0}^{t}dt_n\,\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \tag{35$'$}$$

と書ける。(35′) または (34) は積の順序を指定してある以外は，ふつうの exp と同じで，これを**順序をつけた exp** とよぶことがある。そして(35′)は

$$U(t,t_0)=\mathrm{T}\left[\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}dt'H_1(t')\right\}\right] \tag{35$''$}$$

と書くこともある。

5-4 断熱定理

ハミルトニアン H を H_0+H_1 と二つの部分に分けたとき，H_0 の固有関数，固有値から，H の固有関数，固有値を求める方法に，**断熱定理**(adiabatic theorem)がある〔これは Gell-Mann(ゲルマン)-Low(ロウ)の定理ともいわれる〕。

断熱定理 無限の過去 ($t\to-\infty$) にはハミルトニアンは H_0 であったとし，それから出発して相互作用 H_1 をきわめてゆっくりと(断熱的に)入れて，現在 ($t=0$) にはちょうどその強さが H_1 になり，さらに

* Fermi 粒子に対する生成または消滅演算子を奇数個含むものを Fermi 型，偶数個(0 も含む)含むものを Bose 型という。Bose 粒子の演算子の数はどちらでもよい。ハミルトニアンはどんな系に対しても Bose 型になっている。

時間がたつとだんだん弱くなり，無限の未来 ($t\to\infty$) にはハミルトニアンは再び H_0 になったとする。すなわち

$$H=H_0+H_1e^{-\epsilon|t|} \qquad (\epsilon \text{ は無限に小さい正の数}) \tag{37}$$

すると(34)または(36)の $U(t,t_0)$ で t_0 を $-\infty$ にすることができる〔それを $U_\epsilon(t,-\infty)$ と書く〕。いま H_0 の固有関数を Φ，その固有値を E_0 とする。すなわち

$$H_0\Phi=E_0\Phi$$

このとき

$$\lim_{\epsilon\to0+}\frac{U_\epsilon(0,-\infty)\Phi}{(\Phi,\ U_\epsilon(0,-\infty)\Phi)}\equiv\frac{\Psi}{(\Phi,\ \Psi)} \tag{38}$$

が存在すれば，これは $H=H_0+H_1$ の固有関数である。すなわち

$$H\frac{\Psi}{(\Phi,\ \Psi)}=E\frac{\Psi}{(\Phi,\ \Psi)} \tag{39}$$

同様に $U(t,t_0)$ で $t_0\to\infty$ として，$U_\epsilon{}^*(\infty,t)=U_\epsilon(t,\infty)$ を使い

$$\lim_{\epsilon\to0+}\frac{U_\epsilon(0,\infty)\Phi}{(\Phi,\ U_\epsilon(0,\ \infty)\Phi)}\equiv\frac{\Psi'}{(\Phi,\ \Psi')} \tag{38'}$$

に対しても(39)が成り立つ。

証明　この定理の証明は次のようにしてできる。まず

$$\begin{aligned}\Psi_\epsilon&=U_\epsilon(0,\ -\infty)\Phi\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_ne^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\\&\quad\times\mathrm{T}\,[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)]\Phi\end{aligned} \tag{40}$$

とおく。すると

$$(H_0-E_0)\Psi_\epsilon=[H_0,\ U_\epsilon(0,\ -\infty)]\Phi \tag{41}$$

であるが，

$$\begin{aligned}[H_0,\ U_\epsilon(0,-\infty)]&=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_ne^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\\&\quad\times\mathrm{T}\,[[H_0,\ H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)]]\\&=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_ne^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\\&\quad\times\frac{\hbar}{i}\mathrm{T}\left[\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\{H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)\}\right]\end{aligned} \tag{42}$$

である。ただし

$$[A,\ BC]=[A,\ B]C+B[A,\ C] \tag{43}$$

をくり返し使い，(27)を用いた。ところで

$$\mathrm{T}\left[\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\{H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)\}\right]=\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial t_i}\mathrm{T}\,[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)]$$

であることが容易に示される。それは左辺と右辺の差はTに含まれる階段関数θの微分だけであるが,

$$\frac{\partial}{\partial x}\theta(x)=\delta(x) \tag{44}$$

を使えば

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_1}+\frac{\partial}{\partial t_2}\right)\theta(t_1-t_2)=0$$

が成り立つので，結局上の等式が成り立つからである。これを(42)に使い，かつt_iについての微分はすべて同じ結果を与えることを利用すれば

$$[H_0,\ U_\epsilon(0,-\infty)]=-\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n-1}\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}$$
$$\times\frac{\partial}{\partial t_1}\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)]$$

となる。これをt_1について部分積分を行なえば

$$[H_0,\ U_\epsilon(0,-\infty)]=-H_1(0)\,U_\epsilon(0,-\infty)+\epsilon\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n-1)!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^{n-1}$$
$$\times\int_{-\infty}^{0}\cdots\int_{-\infty}^{0}dt_1\cdots dt_n e^{\epsilon(t_1+\cdots+t_n)}\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)] \tag{45}$$

となる。ところでH_1がある定数gに比例しているとすると，(45)の第二項は

$$i\hbar\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}U_\epsilon(0,-\infty)$$

に等しいことがすぐわかる。こうして(41)は

$$(H-E_0)\Psi_\epsilon=i\hbar\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}\Psi_\epsilon \tag{46}$$

と書ける。したがって

$$X_\epsilon=\frac{U_\epsilon(0,-\infty)\Phi}{(\Phi,\ U_\epsilon(0,-\infty)\Phi)}=\frac{\Psi_\epsilon}{(\Phi,\ \Psi_\epsilon)} \tag{47}$$

に対しては

$$(H-E_0)X_\epsilon=i\hbar\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}X_\epsilon-X_\epsilon\left\{i\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}\log(\Phi,\ \Psi_\epsilon)\right\} \tag{48}$$

が成立する。

ここで(38)が存在するとすれば，(48)で $\epsilon\to 0$ として

$$(H-E)\frac{\Psi}{(\Phi,\ \Psi)}=0 \tag{49}$$

$$E=E_0-i\lim_{\epsilon\to 0+}\epsilon g\frac{\partial}{\partial g}\log(\Phi,\ \Psi) \tag{50}$$

が成り立つことになる*。(証明終わり)

(50)のEは，(48)にΦ^*を掛けて積分し，$(\Phi,\ X_\epsilon)=1$ を使えば

* (50)の第二項はϵに比例し，したがって $\epsilon\to 0$ では $E=E_0$ になるようにみえるが，実はΨ_ϵの位相は $\epsilon\to 0$ では $1/\epsilon$ に比例し，第二項はϵによらない定数になるのである。

$$E=E_0+(\Phi,\ H_1\Psi)/(\Phi,\ \Psi) \tag{51}$$

となることが示される。

以上の議論は Φ が H_0 の固有関数であれば，$\Psi/(\Phi,\ \Psi)$ は H の固有関数であることを示したものであるが，さらに同じことが(38′)の $\Psi'/(\Phi, \Psi')$ に対しても成り立ち，その固有値は $\Psi/(\Phi,\ \Psi)$ と同じであることが示される。したがって，もし(51)の固有値に対する固有関数が縮退していなければ，両者とも Φ との内積が1に等しいので位相を含めて両者は一致するはずである。とくに Φ が H_0 の基底状態の場合は，Ψ, Ψ' も H の基底状態を表わし，基底状態は縮退していないと考えられるから，Ψ と Ψ' とは一致する。

5-5 基底状態における物理量の計算

相互作用をしている系の基底状態 Ψ_0 における物理量 A の期待値は

$$\frac{(\Psi_0|A_{\mathrm{H}}|\Psi_0)}{(\Psi_0|\Psi_0)}$$

で与えられる。ここで後の便利のため，A_{H} としてとくに時刻 t における値 $A_{\mathrm{H}}(t)$ を問題にする。つまり

$$\frac{(\Psi_0|A_{\mathrm{H}}(t)|\Psi_0)}{(\Psi_0|\Psi_0)} \tag{52}$$

の計算法を考える*。ここで Ψ_0 として(38)の形，つまり

$$\Psi_0=\frac{U_\epsilon(0,-\infty)\Phi_0}{(\Phi_0|U_\epsilon(0,-\infty)|\Phi_0)} \tag{53}$$

を用いる。Φ_0 は H_0 の基底状態の波動関数である。(53)を(52)に代入すると，まず分母は

$$\begin{aligned}(\Psi_0|\Psi_0)&=(\Phi_0|U_\epsilon(\infty,0)\,U_\epsilon(0,-\infty)|\Phi_0)/|(\Phi_0|U_\epsilon(0,-\infty)|\Phi)|^2\\&=(\Phi_0|U_\epsilon(\infty,-\infty)|\Phi_0)/|(\Phi_0|U_\epsilon(0,-\infty)|\Phi_0)|^2\end{aligned}$$

となる。次に分子は，$A_{\mathrm{H}}(t)$ を相互作用表示にすると

$$A_{\mathrm{H}}(t)=U(0,t)\,A_{\mathrm{I}}(t)\,U(t,0)$$

であるから，

$$\begin{aligned}&(\Phi_0|U_\epsilon(\infty,0)\,U_\epsilon(0,t)\,A_{\mathrm{I}}(t)\,U_\epsilon(t,0)\,U_\epsilon(0,-\infty)|\Phi_0)/|(\Phi_0|U_\epsilon(0,-\infty)|\Phi_0)|^2\\&\quad=(\Phi_0|U_\epsilon(\infty,t)\,A_{\mathrm{I}}(t)\,U_\epsilon(t,-\infty)|\Phi_0)/|(\Phi_0|U_\epsilon(0,-\infty)|\Phi_0)|^2\end{aligned}$$

となり，結局(53)は

---

* $A_{\mathrm{H}}(t)$ の Ψ_0 での期待値は実は t にはよらないが，便宜上 t を入れておく。

$$\frac{(\Psi_0|A_{\mathrm{H}}(t)|\Psi_0)}{(\Psi_0|\Psi_0)}=\frac{(\Phi_0|U_\epsilon(\infty,t)\,A_{\mathrm{I}}(t)\,U_\epsilon(t,-\infty)|\Phi_0)}{(\Phi_0|U_\epsilon(\infty,-\infty)|\Phi_0)} \tag{54}$$

と Φ_0 での期待値を計算すればよいことになる。

(54)の分子を H_1 で展開して，もっと具体的な形に書くと，

$$\begin{aligned}&U_\epsilon(\infty,t)\,A_{\mathrm{I}}(t)\,U(t,-\infty)\\&=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_n e^{-\epsilon(|t_1|+\cdots+|t_n|)}\\&\quad\times\mathrm{T}\,[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)\,A_{\mathrm{I}}(t)]\end{aligned} \tag{55}$$

となることが示される。

証明 (55)の右辺の n 次の項の T 積で，$t_1,\cdots,t_n$ の中で t より前のものが μ 個と，後のものが $\nu=n-\mu$ 個あるとすると

$$\mathrm{T}\,[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)A_{\mathrm{I}}(t)]=\mathrm{T}\,[H_1(t_1')\cdots H_1(t_\mu')]A_{\mathrm{I}}(t)\,\mathrm{T}\,[H_1(t_1'')\cdots H_1(t_\nu')]$$

と書けることに注意する。ところで $t_1,\cdots,t_n$ をこのように分ける分け方の数は $n!/\mu!\nu!$ なので，これを右辺に入れると，左辺の $U_\epsilon(\infty,t)$, $U_\epsilon(t,-\infty)$ をそれぞれ展開した形になり，(55)が正しいことがわかる。(証明終わり)

こうして

$$\begin{aligned}&\frac{(\Psi_0|A_{\mathrm{H}}(t)|\Psi_0)}{(\Psi_0|\Psi_0)}\\&=\frac{1}{(\Phi_0|S|\Phi_0)}(\Phi_0|\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_n e^{-\epsilon(|t_1|+\cdots+|t_n|)}\\&\quad\times\mathrm{T}\,[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)\,A(t)]|\Phi_0)\end{aligned} \tag{56}$$

$$S=U_\epsilon(\infty,-\infty) \tag{57}$$

と書け，右辺は原則として計算できる形になっている。

同様にして違う時刻の物理量の積 $A_{\mathrm{H}}(t)B_{\mathrm{H}}(t')$ の期待値は

$$\begin{aligned}&\frac{(\Psi_0|\mathrm{T}\,[A_{\mathrm{H}}(t)\,B_{\mathrm{H}}(t')]|\Psi_0)}{(\Psi_0|\Psi_0)}\\&=\frac{1}{(\Phi_0|S|\Phi_0)}(\Phi_0|\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_n e^{-\epsilon(|t_1|+\cdots+|t_n|)}\\&\qquad\times\mathrm{T}\,[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)\,A_{\mathrm{I}}(t)\,B_{\mathrm{I}}(t')]|\Phi_0)\end{aligned} \tag{58}$$

と書ける。これは実は後に述べるように Green 関数とよばれ，いろいろな物理量の計算に便利な量である。

計算法 (56)や(58)の分母，分子を組織的に計算する方法を考える。まず相互作用として

$$H_1=\frac{1}{2}\iint d^3\boldsymbol{r}d^3\boldsymbol{r}'\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}) \tag{59}$$

という形を考える。ただしスピンについては

$$\sum_{\alpha,\beta}\sum_{\alpha',\beta'}\psi_\alpha^\dagger\psi_\beta^\dagger v_{\alpha\beta,\alpha'\beta'}\psi_{\beta'}\psi_{\alpha'}$$

というように和になっているものと考えておく。

(59)を相互作用表示にすると

$$H_1(t)=\frac{1}{2}\iint d^3\boldsymbol{r}d^3\boldsymbol{r}'\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t)\psi^\dagger(\boldsymbol{r}',t)v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}',t)\psi(\boldsymbol{r},t)$$

となるが，$\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{t}$ について対称な形にするため

$$U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}',\ t-t')=v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta(t-t') \tag{60}$$

として

$$\int_{-\infty}^{\infty}H_1(t)dt=\frac{1}{2}\int dt\int dt'\int d^3\boldsymbol{r}\int d^3\boldsymbol{r}'\psi^\dagger(\boldsymbol{r},t)\psi^\dagger(\boldsymbol{r}',t')$$

$$\times U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}',\ t-t')\psi(\boldsymbol{r}',t')\psi(\boldsymbol{r},t)$$

と表わすことにする。さらに $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{t}$ を合わせて $\boldsymbol{x}$ と書いて*,

$$\int_{-\infty}^{\infty}H_1(t)dt=\frac{1}{2}\iint dxdx'\psi^\dagger(x)\psi^\dagger(x')U(x-x')\psi(x')\psi(x) \tag{61}$$

と書くことにする。同様にして，どんな演算子でも $\psi^\dagger(x)$, $\psi(x')$ の積の積分の形で表わされているから，(56)や(58)を計算するには，

$$(\Phi_0|\mathrm{T}\ [\psi^\dagger\psi^\dagger\psi\psi\cdots\psi^\dagger\psi]|\Phi_0) \tag{62}$$

という形の期待値を計算することが必要になる。次にこれの計算法について説明することにする。

コントラクション　まず(62)の T 積を N 積で書き直すことを考える。N 積とは **4-2** で述べたように，場の演算子を適当な生成演算子と消滅演算子で書き表わし，消滅演算子を Φ_0 に演算すると 0 になるようにするとき，生成演算子は消滅演算子より常に左にくるようにした積のことで，これの Φ_0 での期待値は 0 になる。

以下ではまず Fermi 粒子系について話を進め，Bose 粒子系については後で説明することにする。相互作用のないときの Fermi 系の基底状態 Φ_0 は，運動量が p_F 以下の軌道はすべて粒子が入り，p_F 以上の軌道には粒子はいない状態である。運動量 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ の軌道に対する生成，消滅演算子を，それぞれ $a_{\boldsymbol{k}}^\dagger$, $a_{\boldsymbol{k}}$ と書くと

$$\Phi_0=\prod_{k_i\le k_\mathrm{F}}a_{\boldsymbol{k}_i}^\dagger|0\rangle \qquad (k_\mathrm{F}=p_\mathrm{F}/\hbar)$$

---

* このように空間と時間を合わせて 4 次元ベクトルで表わすことは，相対論的に不変な形に書き表わすときに便利であり，場の理論ではなじみのことである。

で与えられる。したがって 4-2 と同じように

$$a_{\boldsymbol{k}}\Phi_0=0 \quad (k>k_{\mathrm{F}}), \qquad a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}\Phi_0=0 \quad (k\leq k_{\mathrm{F}})$$

であるから，$k\leq k_{\mathrm{F}}$ に対しては $a_{\boldsymbol{k}}$ と $a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}$ を交換しておくと，すべての $\boldsymbol{k}$ に対し

$$a_{\boldsymbol{k}}\Phi_0=0$$

となる。これに対応して場の演算子 $\psi(x)$ も

$$\begin{aligned}\psi(x)&=\psi_1(x)+\psi_2{}^{\dagger}(x)\\ \psi^{\dagger}(x)&=\psi_1{}^{\dagger}(x)+\psi_2(x)\end{aligned} \tag{63}$$

$$\begin{aligned}\psi_1(x)&=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_{k>k_{\mathrm{F}}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}t}a_{\boldsymbol{k}}\\ \psi_2{}^{\dagger}(x)&=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_{k\leq k_{\mathrm{F}}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}t}a_{\boldsymbol{k}}\end{aligned} \tag{64}$$

($\epsilon_{\boldsymbol{k}}=\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}$ は自由粒子のエネルギー)

と書くことにすると

$$\psi_1(x)\Phi_0=0, \qquad \psi_2(x)\Phi_0=0$$

である。そして N 積とは，$\psi_i{}^{\dagger}$ がいつも ψ_i の左にくるようにした積のことである。

以上のように定義した N 積を用いて，二つの場の演算子 A, B に対して

$$\dot{A}\dot{B}=\mathrm{T}\,[AB]-\mathrm{N}\,[AB] \tag{65}$$

を定義し，これを**コントラクション** (contraction) とよぶ*。Fermi 型の演算子に対しては，コントラクションは次の性質をもつ。

i) $$\dot{A}\dot{B}=-\dot{B}\dot{A} \tag{66}$$

ii) $$(\dot{A}+\dot{B})\dot{C}=\dot{A}\dot{C}+\dot{B}\dot{C} \tag{67}$$

iii) A と B とが反可換のときは，

$$\dot{A}\dot{B}=0 \qquad (AB+BA=0 \text{ のとき})$$

i)，ii) は定義から明らかであろう。iii) は次のように証明できる。まず

$$\mathrm{T}\,[AB]=AB\theta(t_A-t_B)-BA\theta(t_B-t_A)$$

であるが，$AB=-BA$ だから $\mathrm{T}\,[AB]=AB$ である**。また $\mathrm{N}[AB]=AB$ または $-BA$ であるから，$\mathrm{N}\,[AB]=AB$. ゆえに $\dot{A}\dot{B}=0$. Bose 型の演算子に対しては，i) の右辺の－を＋に変え，iii) を A と B とが可換のとき，つまり $AB-BA=0$ のとき $\dot{A}\dot{B}=0$ と改めればよい。

---

* しいて日本語に訳せば“縮約”になるが，ここでは原語のまま使うことにする。

** ただし $\theta(t_A-t_B)+\theta(t_B-t_A)=1$ を用いる。

以上の性質を使えば，Fermi 演算子(63)に対し

$$\dot{\psi}(x)\dot{\psi}(y)=\dot{\psi}^{\dagger}(x)\dot{\psi}^{\dagger}(y)=0 \tag{68}$$

$$\dot{\psi}(x)\dot{\psi}^{\dagger}(y)=\dot{\psi}_1(x)\dot{\psi}_1{}^{\dagger}(y)+\dot{\psi}_2{}^{\dagger}(x)\dot{\psi}_2(y) \tag{69}$$

であることは明らかである。(69)の右辺の各項は次のように計算できる。まず定義により

$$\begin{aligned}\dot{\psi}_1(x)\dot{\psi}_1{}^{\dagger}(y)=&\{\psi_1(x)\psi_1{}^{\dagger}(y)\theta(t_x-t_y)-\psi_1{}^{\dagger}(y)\psi_1(x)\theta(t_y-t_x)\}\\&-\{-\psi_1{}^{\dagger}(y)\psi_1(x)\}\\=&\{\psi_1(x)\psi_1{}^{\dagger}(y)+\psi_1{}^{\dagger}(y)\psi_1(x)\}\theta(t_x-t_y)\end{aligned}$$

となるが，(64)を使えば

$$\begin{aligned}&\dot{\psi}_1(x)\dot{\psi}_1{}^{\dagger}(y)\\&=\theta(t_x-t_y)\frac{1}{\Omega}\sum_{k>k_{\mathrm{F}}}\sum_{k'>k_{\mathrm{F}}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{y}}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}t_x+i\omega_{\boldsymbol{k}'}t_y}(a_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}'}{}^{\dagger}+a_{\boldsymbol{k}'}{}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}})\\&=\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}(t_x-t_y)}\theta(k-k_{\mathrm{F}})\theta(t_x-t_y)\end{aligned}$$

となる。同様にして

$$\dot{\psi}_2{}^{\dagger}(x)\dot{\psi}_2(y)=-\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}(t_x-t_y)}\theta(k_{\mathrm{F}}-k)\theta(t_y-t_x)$$

と計算され，(69)は

$$\begin{aligned}\dot{\psi}(x)\dot{\psi}^{\dagger}(y)=&\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}(t_x-t_y)}\\&\times\{\theta(k-k_{\mathrm{F}})\theta(t_x-t_y)-\theta(k_{\mathrm{F}}-k)\theta(t_y-t_x)\}\\\equiv&\, iG_0(x-y)\end{aligned}\tag{70}$$

となる。$G_0(x-y)$ は後で述べるように，自由な Fermi 粒子の Green 関数とよばれるものであり，これが演算子ではなく c 数であることが重要である。

以上の議論ではスピン自由度をあらわには考えなかったが，これをα, β と書くと

$$\dot{\psi}_{\alpha}(x)\dot{\psi}_{\beta}{}^{\dagger}(y)=i\delta_{\alpha\beta}G_0(x-y) \tag{70'}$$

となる。

5-6 Wick の定理

前節では二つの演算子に対するコントラクションを計算した。次に(62)

のような多数の演算子の T 積を，N 積とコントラクションで表わすことを考える。そのためにまず次の補助定理を証明する。

補助定理 B の時刻が $A_1, A_2, \cdots, A_n$ のいずれよりも前のとき，次式のように表わせる。

$$\mathrm{N}[A_1\cdots A_n]B$$
$$=\mathrm{N}[A_1\cdots A_{n-1}]\dot{A}_n\dot{B}-\mathrm{N}[A_1\cdots A_{n-2}A_n]A_{n-1}\dot{B}+\cdots$$
$$+(-1)^{n-1}\mathrm{N}[A_2\cdots A_n]\dot{A}_1\dot{B}+\mathrm{N}[A_1\cdots A_nB] \tag{71}$$

証明 i) B が消滅演算子のときは，$\mathrm{N}[A_jB]=A_jB$ であり，B の時刻は A_j よりも前であるから $\mathrm{T}[A_iB]=A_jB$. したがって $\dot{A}_j\dot{B}=0$ である。さらに

$$\mathrm{N}[A_1\cdots A_nB]=\mathrm{N}[A_1\cdots A_n]B$$

であるから(71)はたしかに成り立つ。

ii) B が生成演算子のときは，$A_1, \cdots, A_n$ の中に生成演算子があっても，それと B とのコントラクションは0であり，N 積では $\mathrm{N}[A_1\cdots A_n]B$ でも $\mathrm{N}[A_1\cdots A_nB]$ でも生成演算子はすべて左へ集められて B との順序のいれかえはおきないので(71)が成立するかどうかには関係ない。つまり $A_1, \cdots, A_n$ がすべて消滅演算子であるとして証明すればよいことになる。

iii) $A_1, \cdots, A_n$ がすべて消滅演算子で B が生成演算子のときは，数学的帰納法を用いる。まず $n=1$ のときは(71)は

$$A_1B=\dot{A}_1\dot{B}+\mathrm{N}[A_1B]$$

であるが，仮定により $A_1B=\mathrm{T}[A_1B]$ であるから，これはコントラクションの定義(65)にほかならない。

次に $n=n$ のとき(71)が成立するとして，$n+1$ のときにも成立することを証明する。つまり(71)が成り立つとして B より後の時刻の消滅演算子 A に対して

$$\mathrm{N}[AA_1\cdots A_n]B=\mathrm{N}[AA_1\cdots A_{n-1}]\dot{A}_n\dot{B}-\cdots+(-1)^{n-1}\mathrm{N}[AA_2\cdots A_n]\dot{A}_1\dot{B}$$
$$+(-1)^n\mathrm{N}[A_1\cdots A_n]\dot{A}\dot{B}+\mathrm{N}[AA_1\cdots A_nB] \tag{72}$$

が成り立つことを示せばよい。ところが左辺は $A\,\mathrm{N}[A_1\cdots A_n]B$ に等しく，これに(71)を使うと

$$左辺=A\{\mathrm{N}[A_1\cdots A_{n-1}]\dot{A}_n\dot{B}-\cdots+(-1)^{n-1}\mathrm{N}[A_2\cdots A_n]\dot{A}_1\dot{B}$$
$$+\mathrm{N}[A_1\cdots A_nB]\}$$

である。$A_1, \cdots, A_n$ はすべて消滅演算子であるから，上式の A は最後の項を除けば N 積の中に入れてもよい。最後の項は

$$\begin{aligned}A\,\mathrm{N}[A_1\cdots A_nB]&=(-1)^nABA_1\cdots A_n\\&=(-1)^n\,\mathrm{T}[AB]A_1\cdots A_n\qquad(\because\ t_A>t_B)\\&=(-1)^n\{\dot{A}\dot{B}+\mathrm{N}[AB]\}A_1\cdots A_n\\&=(-1)^n\,\mathrm{N}[A_1\cdots A_n]\dot{A}\dot{B}+(-1)^{n+1}BAA_1\cdots A_n\\&=(-1)^n\,\mathrm{N}[A_1\cdots A_n]\dot{A}\dot{B}+\mathrm{N}[AA_1\cdots A_nB]\end{aligned}$$

となるので，(72)が成り立つことがわかる。(証明終わり)

この補助定理から，次の重要な Wick(ウイック)の定理の証明ができる。

Wick の定理 任意の場の演算子 $A_1, \cdots, A_n$ の T 積は，何組かの演算子についてはコントラクションをとり，残りの演算子についてはN 積にしたものの和として表わされる。式で書くと

$$\begin{aligned}\mathrm{T}\,[A_1\cdots A_n]=&\mathrm{N}\,[A_1\cdots A_n]\\&+\sum_{i>j=1}^{n}(-1)^{\epsilon_P}\dot{A}_i\dot{A}_j\,\mathrm{N}\,[A_1\cdots\overset{i,j}{\vee}\cdots A_n]\\&+\sum_{i>j}\sum_{k>l}(-1)^{\epsilon_P}(\dot{A}_i\dot{A}_j)(\dot{A}_k\dot{A}_l)\,\mathrm{N}\,[A_1\cdots\overset{i,j,k,l}{\vee}\cdots A_n]\\&+\cdots\\&+\sum\cdots\sum(-1)^{\epsilon_P}(\dot{A}_{i_1}\dot{A}_{i_2})(\dot{A}_{i_3}\dot{A}_{i_4})\cdots\end{aligned}\tag{73}$$

ただし $\mathrm{N}\,[A_1\cdots\overset{i,j}{\vee}\cdots A_n]$ は $A_1, \cdots, A_n$ から A_i, A_j を除いた残りのものの N 積であり，ϵ_P は $A_1\cdots A_n$ を $A_iA_jA_1\cdots\overset{i,j}{\vee}\cdots A_n$ に並べかえる置換の偶奇に従って 0 または 1 をとる。最後の項は，n が偶数のときは 2 個ずつ $n/2$ 個の対に分け，それぞれの対のコントラクションの積をとったものの和であり，n が奇数のときは $(n-1)/2$ 組の対のコントラクションに残りの 1 個の演算子をつけたものの和である。

証明 数学的帰納法を用いる。まず $n=1$ のときは，(73) は

$$\mathrm{T}\,[A_1A_2]=\mathrm{N}\,[A_1A_2]+\dot{A}_1\dot{A}_2$$

であるが，これはコントラクションの定義である。次に $n=n$ のとき (73) が成り立つとして，$n+1$ のときを考える。$A_1\cdots A_{n+1}$ の中で時刻が一番早いものを A_{n+1} とすると

$$\mathrm{T}\,[A_1\cdots A_{n+1}]=\mathrm{T}\,[A_1\cdots A_n]A_{n+1}$$

であるが，$\mathrm{T}\,[A_1\cdots A_n]$ に対して (73) を使い，(73) の右辺に右から A_{n+1} を掛けたものを考える。これは N 積に A_{n+1} を掛けたものの和であるので，各項に補助定理を用いれば，A_{n+1} と $A_j\,(j=1, 2, \cdots, n)$ とのコントラクションがすべての組み合わせで得られ，(73) で n を $n+1$ とした式になることがわかる。(証明終わり)

以上の諸定理は，Bose 型演算子に対しては $(-1)^{\epsilon_P}$ をすべて $+1$ とおけばそのまま成り立つことを注意しておく。

5-7 Feynmann グラフ

Wick の定理を (62) に適用すると，N 積の Φ_0 での期待値はすべて 0 になるから，(73) で最後の項だけが残り

$$(\Phi_0|\mathrm{T}\,[A_1\cdots A_n]|\Phi_0)=\sum(\pm1)^{\epsilon_P}(\dot{A}_{i_1}\dot{A}_{i_2})(\dot{A}_{i_3}\dot{A}_{i_4})\cdots\tag{74}$$

となる*。ただし＋は Bose 型，－は Fermi 型演算子の場合である。つまり T 積の Φ_0 での期待値は，演算子を 2 個ずつの対に分け，各対のコントラクションの積をつくり，それをあらゆる分け方について和をとったものに等しい。この際 Fermi 粒子系ではならべ方によって $+1$ または -1 をつける。これを使って(56)や(58)の分子の各項を，グラフ(図形)で表わすことを考える。たとえば (58) で，$A=\psi(\boldsymbol{r})$, $B=\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')$ をとって各項を順番に考える。まず第一項 ($n=0$) は

$$(\Phi_0|\mathrm{T}\,[\psi(x)\psi^\dagger(x')]|\Phi_0)=\dot{\psi}(x)\dot{\psi}^\dagger(x')=iG_0(x-x') \tag{75}$$

で与えられることはすぐにわかる。次の項 ($n=1$) は (61) を使って

$$\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\frac{1}{2}\iint dx_1dx_1'U(x_1-x_1')$$
$$\times(\Phi_0|\mathrm{T}\,[\psi^\dagger(x_1)\psi^\dagger(x_1')\psi(x_1')\psi(x_1)\psi(x)\psi^\dagger(x')]|\Phi_0) \tag{76}$$

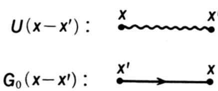
と表わされるが，(74)を使えば

$$\begin{aligned}(\Phi_0|\mathrm{T}\,&[\psi^\dagger(x_1)\psi^\dagger(x_1')\psi(x_1')\psi(x_1)\psi(x)\psi^\dagger(x')]|\Phi_0)\\ &=(\dot{\psi}^\dagger(x_1)\dot{\psi}(x_1))(\dot{\psi}^\dagger(x_1')\dot{\psi}(x_1'))(\dot{\psi}(x)\dot{\psi}^\dagger(x'))\\ &\quad-(\dot{\psi}^\dagger(x_1)\dot{\psi}(x_1'))(\dot{\psi}^\dagger(x_1')\dot{\psi}(x_1))(\dot{\psi}(x)\dot{\psi}^\dagger(x'))\\ &\quad-(\dot{\psi}^\dagger(x_1)\dot{\psi}(x))(\dot{\psi}^\dagger(x_1')\dot{\psi}(x_1'))(\dot{\psi}(x_1)\dot{\psi}^\dagger(x'))\\ &\quad+(\dot{\psi}^\dagger(x_1)\dot{\psi}(x_1'))(\dot{\psi}^\dagger(x_1')\dot{\psi}(x))(\dot{\psi}(x_1)\dot{\psi}^\dagger(x'))\\ &\quad-(\dot{\psi}^\dagger(x_1)\dot{\psi}(x_1))(\dot{\psi}^\dagger(x_1')\dot{\psi}(x))(\dot{\psi}(x_1')\dot{\psi}^\dagger(x'))\\ &\quad+(\dot{\psi}^\dagger(x_1)\dot{\psi}(x))(\dot{\psi}^\dagger(x_1')\dot{\psi}(x_1))(\dot{\psi}(x_1')\dot{\psi}^\dagger(x'))\end{aligned}$$

とコントラクションで表わすことができる**。これを G_0 を使って書けば

$$\begin{aligned}i^3\{&G_0(x_1-x_1)G_0(x_1'-x_1')G_0(x-x') && \text{(a)}\\ &-G_0(x_1'-x_1)G_0(x_1-x_1')G_0(x-x') && \text{(b)}\\ &-G_0(x-x_1)G_0(x_1'-x_1')G_0(x_1-x') && \text{(c)}\\ &+G_0(x_1'-x_1)G_0(x-x_1')G_0(x_1-x') && \text{(d)}\\ &-G_0(x_1-x_1)G_0(x-x_1')G_0(x_1'-x') && \text{(e)}\\ &+G_0(x-x_1)G_0(x_1-x_1')G_0(x_1'-x')\} && \text{(f)}\end{aligned} \tag{77}$$

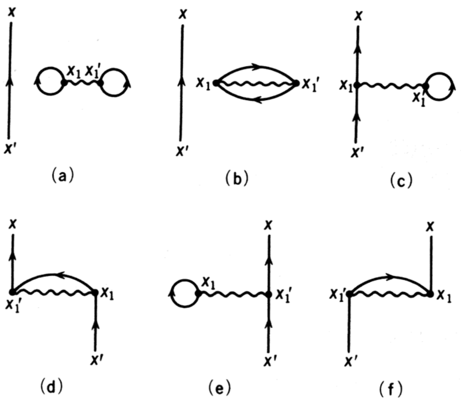
となる。これを(76)に代入して各項をグラフに表わすには，まず $U(x_1-x_1')$ は，二つの点 x_1 と x_1' を波線〰〰で結んで表わし，(75)の $G_0(x-x')$ は点 x' から x まで矢印をつけ



5·5 図

* n が奇数のときは恒等的に 0 になる。

** これ以外の組み合わせのコントラクションはすべて 0 になる。



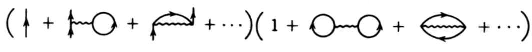
5·6 図



5·7 図

た実線を引いて表わすことにする(5·5図)。すると(77)の六つの項に対応して5·6図の6個のグラフがかけることになる。(75)の第一項はこのようにすれば5·7図のようにただ1本の実線で表わされることになる。同様にして(58)の分子の任意の項をコントラクションで表わしたものは一つのグラフで表わされ，逆に一つのグラフには(58)のある項のある組み合わせのコントラクションが対応する。

ところで5·6図を見ればわかるように，こういうグラフは二つの種類に大別される。一つは図の(c)から(f)までのようにすべての点が実線または波線でつながっているもの，もう一つは(a), (b)のように $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'$ が $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_1'$ と全く切り離されているグラフである。この後者によって表わされる項は，二つの項の積になっていることになる。したがって5·7図と5·6図を合わせたものは


(78)

を展開した最初の何項かになっており，さらにこれの高次の項は，(58)の分子の展開のどこかに必ず現われているはずである。したがって(58)の分子は二つの積に因数分解され，一方は A, B に含まれる点 $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{x}'$ に何らかの方法でつながったグラフ，他方は $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{x}'$ とは全く関係のないグラフの和になっている。この後者の和は，実は(58)の分母に等しいことは次のようにしてわかる。まず分母は

$$(\Phi_0|S|\Phi_0)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_n e^{-\epsilon(|t_1|+\cdots+|t_n|)}$$
$$\times(\Phi_0|\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)]|\Phi_0) \tag{79}$$

と書け，これの各項をグラフに表わしてみれば(78)の第二の因子になっている。このことは数式で証明することもできる。

いま(58)で $A=\psi$, $B=\psi^\dagger$ とおいたものを $iG(x,x')$ と書き

$$iG(x,x')=\frac{(\Psi_0|\mathrm{T}[\psi(x)\psi^\dagger(x')]|\Psi_0)}{(\Psi_0|\Psi_0)} \tag{80}$$

と定義する。これを(58)のように展開して，その分子を上に述べたようにして，各項を二つの因子の積で表わす。この一方の因子であるつながったグラフの和 (H_1 の次数はとめておいて) を $(\Phi_0|\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)\psi(x)\cdot\psi^\dagger(x')]|\Phi_0)_{\mathrm{conn}}$ と表わすことにすると

$$iG(x,x')=\frac{1}{\langle\Phi_0|S|\Phi_0)}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_n$$
$$\times\sum_{\nu=0}^{n}(\Phi_0|\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_\nu)\psi(x)\psi^\dagger(x')]|\Phi_0)_{\mathrm{conn}}$$
$$\times(\Phi_0|\mathrm{T}[H_1(t_{\nu+1})\cdots H_1(t_n)]|\Phi_0)\times\frac{n!}{\nu!(n-\nu)!}$$

と書ける*。最後の $n!/\nu!(n-\nu)!$ は n 個の H_1 から，つながっているグラフに ν 個，つながっていない方に $(n-\nu)$ 個取り出す方法の数である。上の n と ν についての和を ν と $\mu=n-\nu$ についての和に書き直すと，

$$\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{\nu=0}^{n}=\sum_{\nu=0}^{\infty}\sum_{n=\nu}^{\infty}=\sum_{\nu=0}^{\infty}\sum_{\mu=0}^{\infty}$$

となるから μ についての和はちょうど(79)と同じになり，分母の $(\Phi_0|S|\Phi_0)$ を打ち消す。こうして

$$iG(x,x')=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{-\infty}^{\infty}dt_1\cdots\int_{-\infty}^{\infty}dt_n$$
$$\times(\Phi_0|\mathrm{T}[H_1(t_1)\cdots H_1(t_n)\psi(x)\psi^\dagger(x')]|\Phi_0)_{\mathrm{conn}} \tag{81}$$

となる。

Feynmann グラフ　以上は，基底状態での $\psi(x)\psi^\dagger(x')$ の期待値を例にとって説明してきたが，任意の物理量の期待値にあてはめることができる。このように H_1 で展開しそれをグラフで表わすことは，Feynmann によって提唱されたので，このグラフを **Feynmann グラフ**(または図形)と

* ただし $\exp\{-\epsilon(|t_1|+\cdots+|t_n|)\}$ は簡単のため省略した。

よんでいる（このほかにも摂動計算を別なグラフで表わすことがいくつか提唱されているが，この Feynmann グラフが最も便利で，よく使われている)。

ここで，この Feynmann グラフの作り方と，それに対応する計算法をまとめておく。(81)の H_1 の n 次の項に対して

i) n 個の相互作用に対応して x_i と x_i' $(i=1, 2, \cdots, n)$ を結ぶ n 本の波線を引き，それぞれに $U(x_i-x_i')$ を対応させる。

ii) i)の $2n$ 個の点それぞれに入る実線と出ていく実線を引く。さらにそれ以外の点 x, x' をとり，x には入ってくる実線，x' からは出ていく実線を引き，以上の実線を矢印が一致するようにつなげる。こうして引かれた$(2n+1)$本の実線に対しては，それが y から出て x に入るとき $G_0(x-y)$ を対応させる。

iii) こうしてできたグラフはすべて実線または波線でつながっているものとし，実線のあらゆる結び方について和をとる。ただし幾何学的に同等なグラフについては和をとらない。たとえば5·5図の (c) と (e), (d)と(f)はそれぞれ幾何学的に同等であるから和はとらない。これが H_1 に含まれる1/2の因子を打ち消す。また(81)で n 個の H_1 に現われる (x_1, x_1'), (x_2, x_2'), $\cdots$, (x_n, x_n') を対のまま入れかえるグラフは同じものであり，それが(81)の $1/n!$ を打ち消す。

iv) $x_1, x_1', \cdots, x_n, x_n'$ について各々4次元の積分を行なう。

v) 係数として $-i(i/\hbar)^n$ をつける。(81)には初めから係数 $(-i/\hbar)^n$ があるが，コントラクションを G_0 で書くとき $-i$ がつき，それが全部で $(2n+1)$ 個あるので $(-i)^{2n+1}=-(-1)^n i$ がつく。

vi) グラフに実線だけでできた閉曲線が P 個あるときは $(-1)^P$ をつける。たとえば5·6図の(c)と(e)には(-1)がつく*。これは，実線だけで閉曲線をつくるには，$\psi^\dagger(1)\psi(1)\psi^\dagger(2)\psi(2)\cdots\psi^\dagger(n)\psi(n)$ を
$-\psi(n)\psi^\dagger(1)\psi(1)\psi^\dagger(2)\psi(2)\cdots\psi(n-1)\psi^\dagger(n)$ と並べ直してから
$-(\dot{\psi}(n)\dot{\psi}^\dagger(1))(\dot{\psi}(1)\dot{\psi}^\dagger(2))\cdots(\dot{\psi}(n-1)\dot{\psi}^\dagger(n))$ とコントラクションをとるからである。

vii) 1本の実線だけで閉じているときには $G_0(x, x)$ が現われるが，これは

$$G_0(x, x) \longrightarrow G_0(\boldsymbol{r}t\,;\,\boldsymbol{r}t+0)=i\,(\Phi_0|\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})|\Phi_0)$$

---

* このことは Bose 粒子系のときは不要である。

と解釈する。このことは，たとえば5·5図(c), (e) を実際にかいてみれば明らかであろう。

5-8 運動量空間における Feynmann グラフ

いままでの Feynmann グラフは，空間座標 $\boldsymbol{r}$ と時間 t を用いて表わしたが，たとえば(70)の $G_0(x-y)$ は時間について不連続関数なので実際の計算には不便なことが多い。そこで，$\boldsymbol{r}$, t についてFourier 変換をし，運動量 $\boldsymbol{p}$ と振動数 ω を用い，これを4次元ベクトルにまとめて，k とか p と書くことにする。まず G_0 や U の Fourier 変換を次のように定義する*。

$$G_0(x-x')=\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4pG_0(p)e^{ip(x-x')}$$
$$U(x-x')=\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^4qU(q)e^{iq(x-x')} \tag{82}$$

ただし $px=\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t,\quad d^4p=d^3\boldsymbol{p}d\omega$

と略記した。(82)の逆変換は，たとえば

$$G_0(p)=\int d^4(x-x')G_0(x-x')e^{-ip(x-x')} \tag{83}$$

である**。

$\boldsymbol{p}$, ω を使った例として，(76)の一つの項(77)の(d)と(f)を考える。この二つを合わせると

$$i^3\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\iint dx_1dx_1'U(x_1-x_1')G_0(x_1-x')G_0(x_1'-x_1)G_0(x-x_1')$$

となるが，これに(82)を代入すると

$$i^3\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\iint dx_1dx_1'\int\cdots\int\frac{1}{(2\pi)^{16}}d^4p_1d^4p_2d^4p_3d^4qU(q)G_0(p_1)G_0(p_2)G_0(p_3)$$
$$\times\exp\{iq(x_1-x_1')+ip_1(x_1-x')+ip_2(x_1'-x_1)+ip_3(x-x_1')\}$$

となるが，

$$\int d^4xe^{i(p-p')x}=(2\pi)^4\delta(p-p')\equiv(2\pi)^4\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\delta(\omega-\omega') \tag{84}$$

---

* 運動量 $\boldsymbol{p}$ については，いままでは有限の体積 Ω について周期的境界条件を使い，離散的な値をとるものとし $\sum_{\boldsymbol{p}}$ と書いてきたが，Ω が十分大きなときは，これは

$$\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int d^3\boldsymbol{p}$$

と積分で計算できる。(82)はこれを Ω で割ったものに対応している。

** ただし，定数を空間座標について積分すると，体積 Ω を与えるものとする。

を用いれば

$$i^3\left(-\frac{i}{\hbar}\right)\iint\frac{d^4p_1d^4p_2}{(2\pi)^8}U(p_2-p_1)G_0(p_1)G_0(p_2)G_0(p_1)e^{ip_1(x-x')}$$

と簡単になる。したがって

$$(\Psi_0|\mathrm{T}\,[\psi(x)\psi^\dagger(x')]|\Psi_0)/(\Psi_0,\Psi_0)$$

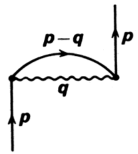
のかわりに，その Fourier 変換*

$$\int\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega(t-t')}(\Psi_0|\mathrm{T}\,[a_p(t)a_p{}^\dagger(t')]|\Psi_0)/(\Psi,\Psi_0)\equiv iG(p) \qquad (85)$$

を考えれば，その展開の(76)にあたる項は

$$i\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int d^4qU(q)G_0(p-q)G_0{}^2(p) \qquad (86)$$

となる。(86)をグラフで示すと5·8図のようになる。グラフとしては前の5·5図の(d), (e)と同じ形であるが，今度は各実線は一つの p を指定するだけでよく，相互作用は $U(q)$ で，各頂点で波線と実線の4次元運動量は保存されている。



5·8 図

以上のことを一般化すると，運動量空間での Feynmann グラフのつくり方は次のようにまとめることができる。(85)の $G(p)$ を H_1 で展開した n 次の項に対して

i) n 本の波線と $(2n+1)$ 本の実線(矢印をつける)のつながった図形をかく。

ii) 各々の線には4次元運動量を対応させ，運動量 p の実線には $G_0(p)$ を，運動量 q の波線には $U(q)$ を対応させる。

iii) 各頂点では実線，波線の運動量は保存させる。

iv) 係数として $i(i/\hbar)^n(-1)^P/(2\pi)^{4n}$ を掛ける。P はグラフに含まれる実線のみでできた閉曲線の数である。

v) 独立な n 個の運動量について積分する**。

vi) 幾何学的に独立なグラフについて和をとる。

---

* 系のハミルトニアンが時間を含まず，また全運動量と可換(並進対称)のときは，上の関数は $x-x'$ のみの関数であり，(85)で a と $a^\dagger$ の添字がそろわないものは0になる。

** 独立な運動量の数が n であることは次のようにしてわかる。n 本の波線と $(2n+1)$ 本の実線があるから，全部で $(3n+1)$ 個の運動量があるが，$2n$ 個の頂点で運動量保存則が成り立つので，独立なものは $(n+1)$ 個になる。このうち1個は初めに与えたものであるので，積分すべき運動量は n 個になる。

$U(q)$ と $G_0(p)$ の表式　最後に $U(q)$ と $G_0(p)$ の具体的な形を示しておく。$U(x)$ は (60) のように時間については δ 関数であるから，その Fourier 変換は振動数に関係しなくなり

$$U(q)=v(\boldsymbol{q}) \tag{87}$$

となる。$G_0(p)$ を求めるには，(70)を

$$G_0(x-x')=\frac{-i}{(2\pi)^3}\int d^3\boldsymbol{p}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{i\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')-i\omega(t-t')}$$
$$\times\{\theta(p-k_F)\theta(t-t')+\theta(k_F-p)\theta(t'-t)\}$$

と書き直し

$$\int_{-\infty}^{\infty}d(t-t')e^{i(\omega-\omega_{\boldsymbol{p}})(t-t')}\theta(t-t')=\int_0^{\infty}dte^{i(\omega-\omega_{\boldsymbol{p}})t}$$

を計算する。この積分は ω に小さな正の虚数部分がついているとして，ω を改めて $\omega+i\eta$ と書けば収束するので

$$\int_{-\infty}^{\infty}d(t-t')e^{i(\omega-\omega_{\boldsymbol{p}})(t-t')}\theta(t-t')=\frac{-1}{i(\omega-\omega_{\boldsymbol{p}}+i\eta)} \tag{88}$$

としてよい。同様に

$$\int_{-\infty}^{\infty}d(t-t')e^{i(\omega-\omega_{\boldsymbol{p}})(t-t')}\theta(t'-t)=\frac{1}{i(\omega-\omega_{\boldsymbol{p}}-i\eta)} \tag{88$'$}$$

となる。ただし $\eta\to0+$ のとき実数 x の積分の中にある因子としては

$$\frac{1}{x\pm i\eta}=\frac{P}{x}\mp i\pi\delta(x) \tag{89}$$

であるとする。ただし P/x は $x=0$ のまわりでは主値積分を行なうことを意味する。

(88), (88′)を用いれば $G_0(x-x')$ の Fourier 変換は

$$G_0(p)=\frac{\theta(|\boldsymbol{p}|-k_F)}{\omega-\omega_{\boldsymbol{p}}+i\eta}+\frac{\theta(k_F-|\boldsymbol{p}|)}{\omega-\omega_{\boldsymbol{p}}-i\eta}$$
$$=\frac{1}{\omega-\omega_{\boldsymbol{p}}+i\eta\,\mathrm{sgn}\,(|\boldsymbol{p}|-k_F)} \tag{90}$$

となることがわかる。ただし

$$\mathrm{sgn}\,x=\begin{cases}1 & (x>0)\\ -1 & (x<0)\end{cases} \tag{91}$$

は x の符号を表わす符号関数である。

5-9 Bose 粒子系における Feynmann グラフ

前節の話は，主として Fermi 粒子系を対象にしてきた。それは Bose 系では他に考慮すべきことがあるからである。相互作用のない Bose 粒子系の基底状態は，すべての粒子は，運動量が 0 の軌道にあって，いわゆる Bose 凝縮が完全におきている。その波動関数は

$$|\Phi_0)=\frac{1}{\sqrt{N!}}(a_0{}^\dagger)^N|0) \tag{92}$$

である(N は全粒子数)。(92)は，運動量が 0 でない粒子に対しては真空と同じで

$$a_{\boldsymbol{k}}|\Phi_0)=0 \qquad (k\neq 0)$$

であり，したがって N 積として $a_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger$ を $a_{\boldsymbol{k}}$ の左におく積と定義しておけば，N 積の $|\Phi_0)$ での期待値はすべて 0 になり，前節までの議論はそのまま適用できる*。

問題は運動量が 0 の a_0, $a_0{}^\dagger$ で，$a_0|\Phi_0)$ も $a_0{}^\dagger|\Phi_0)$ も 0 でないので，どんな順序に並べても $|\Phi_0)$ での期待値は 0 にならず，T 積の期待値をコントラクションだけで表わすことは不可能である。そこでこの a_0, $a_0{}^\dagger$ の取り扱いを考えるため，場の演算子を二つに分ける。

$$\psi(x)=\xi_0+\psi_1(x), \qquad \psi_0{}^\dagger(x)=\xi_0{}^\dagger+\psi_1{}^\dagger(x) \tag{93}$$

$$\xi_0=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}a_0, \qquad \xi_0{}^\dagger=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}a_0{}^\dagger \tag{94}$$

$$\psi_1(x)=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_{k\neq 0}{}' a_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-i\omega_{\boldsymbol{k}}t}, \qquad \psi_1{}^\dagger(x)=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_{k\neq 0}{}' a_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}+i\omega_{\boldsymbol{k}}t} \tag{95}$$

ただし相互作用表示を使い，$\omega_{\boldsymbol{k}}=\epsilon_{\boldsymbol{k}}/\hbar$($\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ は運動エネルギー)とおいた。これに対応してハミルトニアンを書き直しておく**。

$$H=H_0+H_1$$

$$H_0=\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}}=\frac{\hbar^2}{2m}\int\nabla\psi_1{}^\dagger(x)\cdot\nabla\psi_1(x)\,d^3\boldsymbol{r} \tag{96}$$

$$H_1=\frac{1}{2}\iint\psi^\dagger(x)\psi^\dagger(x')v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(x')\psi(x)\,d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r}$$

---

* ただし粒子の奇置換のときに現われる (−1) という因子をなくすことはもちろんである。

** 4-6 を参照のこと。

$$
\begin{aligned}
&=\frac{1}{2}\Omega v(0)(\xi_0{}^\dagger)^2\xi_0{}^2 && \text{(a)}\\
&+\frac{1}{2}v(0)\xi_0{}^\dagger\xi_0\int\psi_1{}^\dagger(x)\psi_1(x)d^3\boldsymbol{r}\times 2 && \text{(b)}\\
&+\frac{1}{2}\xi_0{}^\dagger\xi_0\iint v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi_1{}^\dagger(x)\psi_1(x')d^3\boldsymbol{r}d^3\boldsymbol{r}'\times 2 && \text{(c)}\\
&+\frac{1}{2}(\xi_0{}^\dagger)^2\iint v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi_1(x')\psi_1(x)d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r} && \text{(d)}\\
&+\frac{1}{2}\xi_0{}^2\iint v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi_1{}^\dagger(x)\psi_1{}^\dagger(x')d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r} && \text{(e)}\\
&+\frac{1}{2}\xi_0{}^\dagger\iint v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi_1{}^\dagger(x)\psi_1(x')\psi_1(x)d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r}\times 2 && \text{(f)}\\
&+\frac{1}{2}\xi_0\iint v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi_1{}^\dagger(x)\psi_1{}^\dagger(x')\psi_1(x)d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r}\times 2 && \text{(g)}\\
&+\frac{1}{2}\iint v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi_1{}^\dagger(x)\psi_1{}^\dagger(x')\psi_1(x')\psi_1(x)d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r} && \text{(h)}
\end{aligned}
\tag{97}
$$

H_0 は運動エネルギーで，$\psi_1{}^\dagger$, ψ_1 のみを含み，相互作用 H_1 は，$\xi_0{}^\dagger$, ξ_0 の数によって(a)～(h)までに分けられている*。この ξ_0, $\xi_0{}^\dagger$ は演算子で，その交換関係は

$$[\xi_0,\ \xi_0{}^\dagger]=1/\Omega \tag{98}$$

で与えられ，これは $\xi_0{}^\dagger\xi_0\sim N/\Omega$ に比べてずっと小さい。このことから次のことが示される。ハミルトニアンとして(96)のかわりに

$$H'=H-\mu N \tag{99}$$

を用いるときは，ξ_0, $\xi_0{}^\dagger$ を c 数と考え

$$\xi_0\sim\xi_0{}^\dagger\sim\sqrt{n_0} \tag{100}$$

ととってよい。この n_0 は真の基底状態における $\xi_0{}^\dagger\xi_0$ の期待値で，H' の基底状態の固有値 Φ を最小にするようにきめられる**。つまり

$$\left(\frac{\partial\Phi}{\partial n_0}\right)_\mu=0 \tag{101}$$

* $\xi_0{}^\dagger$, ξ_0 の数が 3 個のもの，つまり ψ_1 または $\psi_1{}^\dagger$ を 1 個だけ含む項は

$$\int\psi_1(x)d^3\boldsymbol{r},\qquad \text{または}\quad \int\psi_1{}^\dagger(x)d^3\boldsymbol{r}$$

という形になり，ψ_1, $\psi_1{}^\dagger$ は $\boldsymbol{k}\neq 0$ のみを含むので 0 になってしまう。

** Φ は 0 K における熱力学ポテンシャルに等しい。

以上のことの数学的証明はいくつかの論文* で行なわれているが，かなり面倒なのでここでは省略する。これが正しいことは **4-6** の話からもある程度推察できるであろう。

こうして Bose 凝縮をおこしている系では，ハミルトニアンとして

$$H'=H_0'+H_1 \tag{102}$$

$$H_0'=\frac{\hbar^2}{2m}\int\nabla\phi_1^\dagger(\boldsymbol{r})\cdot\nabla\phi_1(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}-\mu\int\phi_1^\dagger(\boldsymbol{r})\phi_1(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}$$
$$-\mu n_0+\frac{1}{2}\Omega v(0)n_0^2 \tag{103}$$

$$H_1=\frac{1}{2}n_0\left\{v(0)\int\phi_1^\dagger(\boldsymbol{r})\phi_1(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}+\iint v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_1^\dagger(\boldsymbol{r})\phi_1(\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r}\right\}\times 2 \quad \text{(a, b)}$$
$$+\frac{1}{2}n_0\iint v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_1^\dagger(\boldsymbol{r})\phi_1^\dagger(\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r} \quad \text{(c)}$$
$$+\frac{1}{2}n_0\iint v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_1(\boldsymbol{r})\phi_1(\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r}' \quad \text{(d)}$$
$$+\frac{1}{2}\sqrt{n_0}\iint v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_1^\dagger(\boldsymbol{r})\phi_1^\dagger(\boldsymbol{r}')\phi_1(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r}\times 2 \quad \text{(e)}$$
$$+\frac{1}{2}\sqrt{n_0}\iint v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_1^\dagger(\boldsymbol{r})\phi_1(\boldsymbol{r}')\phi_1(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r}\times 2 \quad \text{(f)}$$
$$+\frac{1}{2}\iint v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_1^\dagger(\boldsymbol{r})\phi_1^\dagger(\boldsymbol{r}')\phi_1(\boldsymbol{r}')\phi_1(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r} \quad \text{(g)} \tag{104}$$

をとり，H_1 についての摂動計算では Feynmann グラフを使うことができる。そこに現われる ϕ_1, $\phi_1^\dagger$ のコントラクションは

$$iG_0(x-x')=\langle \mathrm{T}\,[\phi_1(x)\phi_1^\dagger(x')]\rangle \tag{105}$$

で与えられる。$\langle\cdots\rangle$ は ϕ_1, $\phi_1^\dagger$ についての真空での期待値である。(105) の自由粒子の Green 関数は次のように計算できる。

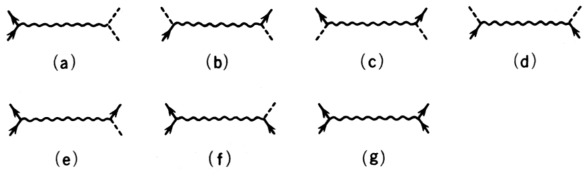
$$iG_0(x-x')=\theta(t-t')\langle\phi_1(x)\phi_1^\dagger(x')\rangle$$
$$=\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}\neq 0}{}'\exp\{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')-i\omega_{\boldsymbol{k}}(t-t')\}\theta(t-t') \tag{106}$$

そしてこれの Fourier 変換は

$$iG_0(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{1}{\omega-\omega_{\boldsymbol{k}}+i\eta} \tag{107}$$

---

* たとえば S. Beliaev, J. Exptl: Theoret. Phys. (U. S. S. R.) **34**, 417 (1958); Soviet Physics, JETP **7**, 289 (1958), N. Hugenholtz and D. Pines: Phys. Rev. **116**, 489 (1959).



5·9 図

で与えられる。

Bose 系と Fermi 系の大きな差は，H_1 に(104)の(a)～(g)のいろいろな型があることで，これをグラフに示すと5·9図のようになる。

Feynmann グラフはこれら7個の型の相互作用を組み合わせたものから成り，そのつくり方や計算法は $(-1)^P$ の因子のないことを除けば全く同じである。(104)では(a), (b), (e), (f)は他のものに比べて2が余計についているが，他のものは〰〰の両側の入れかえに対して対称なので，それぞれに2の因子がかかり，結局は同じ寄与をすることになる。

5-10　有限温度における摂動展開

有限温度で問題になるのは，大きな状態和

$$\Xi=\mathrm{Tr}\,[\exp\{-\beta(H-\mu N)\}],\qquad \beta=1/k_{\mathrm{B}}T \tag{108}$$

であるが

$$H-\mu N=H_0+H_1$$

のとき，H_1 について摂動展開することを考える。ここで

$$\exp\{-\beta(H_0+H_1)\}=\exp(-\beta H_0)\,U(\beta) \tag{109}$$

とおき，

$$\Xi_0=\mathrm{Tr}\,[\exp(-\beta H_0)],\qquad \langle\cdots\rangle=\mathrm{Tr}\,[\exp(-\beta H_0)\cdots]/\Xi_0 \tag{110}$$

と定義すると，(108)の Ξ は

$$\Xi=\Xi_0\langle U(\beta)\rangle \tag{111}$$

と書ける。この $U(\beta)$ は (31) で定義した変換関数 $U(t,t_0)$ で，$t_0=0$, $t=-i\beta\hbar$ とおいたものに等しいことは明らかである。したがって(32)～(34)がそのまま成り立ち

$$U(\beta)=1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^{\beta}\cdots\int_0^{\beta}\mathrm{T}_{\tau}\,[H_1(\tau_1)\cdots H_1(\tau_n)]\,d\tau_1\cdots d\tau_n \tag{112}$$

となる。ただし

$$H_1(\tau)=e^{\tau H_0}H_1e^{-\tau H_1} \tag{113}$$

T_τ は $H_1(\tau_1), \cdots, H_1(\tau_n)$ を $\tau_1, \tau_2, \cdots, \tau_n$ の大きな順に左から並べる演算子である*。(112)を(111)に入れると

$$\Xi=\Xi_0\left\{1+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^\beta\cdots\int_0^\beta\langle \mathrm{T}_\tau[H_1(\tau_1)\cdots H_1(\tau_n)]\rangle d\tau_1\cdots d\tau_n\right\} \tag{114}$$

となる。

さて H_1 は相互作用として

$$H_1=\frac{1}{2}\iint\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}'d^3\boldsymbol{r}$$

$$=\frac{1}{2\Omega}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_1'}(\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'|v|\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_1')a_{\boldsymbol{k}}^\dagger a_{\boldsymbol{k}'}^\dagger a_{\boldsymbol{k}_1'}a_{\boldsymbol{k}_1} \tag{115}$$

$$(\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'|v|\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{k}_1')=\delta_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_1'}v(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_1) \tag{116}$$

$$v(\boldsymbol{q})=\int v(r)e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}}d^3\boldsymbol{r} \tag{117}$$

を考える。また

$$H_0=\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}}^\dagger a_{\boldsymbol{k}}$$

とすると，$H_1(\tau)$ に現われる $a_{\boldsymbol{k}}(\tau)$ は

$$a_{\boldsymbol{k}}(\tau)=a_{\boldsymbol{k}}e^{-\tau\epsilon_{\boldsymbol{k}}},\qquad a_{\boldsymbol{k}}^\dagger(\tau)=a_{\boldsymbol{k}}^\dagger e^{\tau\epsilon_{\boldsymbol{k}}} \tag{118}$$

となることは，(29), (29′)と全く同じである。

計算法　(114)の各項を計算するには，一般に $a_{\boldsymbol{k}}(\tau)$, $a_{\boldsymbol{k}}^\dagger(\tau)$ を A_j と書いて

$$\langle \mathrm{T}_\tau[A_1\cdots A_n]\rangle$$

の計算が必要になる。これの計算法については，Wick の定理の有限温度への拡張というべき，次の定理が成り立つ。

定理　コントラクションとして

$$\dot{A}\dot{B}=\langle \mathrm{T}_\tau[A(\tau)B(\tau')]\rangle \tag{119}$$

を使うと*

$$\langle \mathrm{T}_\tau[A_1\cdots A_n]\rangle=\sum(\pm)^{\epsilon_p}(\dot{A}_{i_1}\dot{A}_{i_2})(\dot{A}_{i_3}\dot{A}_{i_4})\cdots(\dot{A}_{i_{n-1}}\dot{A}_{i_n}) \tag{120}$$

ただし ϵ_p は，1, 2, $\cdots$, n を $i_1, i_2, \cdots, i_n$ に並べかえる置換が，偶置換のときは0，奇置換のときは1をとり，＋は Bose，－は Fermi 系である。和は $A_1, \cdots, A_n$ を2個ずつの対に分けるあらゆる方法についてとる**。

---

*　正しくは $\mathrm{T}_\tau[AB]$ は，$\tau_A>\tau_B$ ならば AB，$\tau_B>\tau_A$ ならば $\pm BA$（＋ は Bose 型，－ は Fermi 型）と定義する。

**　n が奇数のときは(120)は常に0である。

証明 (120)では $\tau_1>\tau_2>\cdots>\tau_n$ と仮定する。その他の順序であっても，両辺の符号は同時に変わるから一般性を失わない。まず次の恒等式に注意する。

$$\begin{aligned}A_1A_2\cdots A_n&=(A_1A_2\mp A_2A_1)A_3\cdots A_n\pm A_2A_1A_3\cdots A_n\\&=(A_1A_2\mp A_2A_1)A_3\cdots A_n\pm A_2(A_1A_3\mp A_3A_1)A_4\cdots A_n+\cdots\\&\quad+A_2A_3\cdots A_{n-1}(A_1A_n\mp A_nA_1)\pm A_2A_3\cdots A_nA_1\end{aligned}$$

ただし n が偶数であることを使っている*。ここで Bose 系に対しては複号の上を，Fermi 系に対しては複号の下を使うと，それぞれの系で $A_iA_j\mp A_jA_i=[A_i,\ A_j]_\pm$ は c 数である。したがって平均 $\langle\cdots\rangle$ をとるときは外に出せて

$$\begin{aligned}\langle A_1A_2\cdots A_n\rangle&=[A_1,\ A_2]_\mp\langle A_3\cdots A_n\rangle\pm[A_1,\ A_3]_\mp\langle A_2A_4\cdots A_n\rangle+\cdots\\&\quad+[A_1,\ A_n]_\mp\langle A_2A_3\cdots A_{n-1}\rangle\pm\langle A_2A_3\cdots A_nA_1\rangle\end{aligned}\tag{121}$$

となる。この最後の項に対しては，$\rho_0=\exp(-\beta H_0)/\Xi_0$ とすると

$$\langle\cdots\rangle=\mathrm{Tr}\,[\rho_0\cdots]$$

であり，$\mathrm{Tr}\,[AB]=\mathrm{Tr}\,[BA]$ を使えば

$$\langle A_2A_3\cdots A_nA_1\rangle=\mathrm{Tr}\,[\rho_0A_2A_3\cdots A_nA_1]=\mathrm{Tr}\,[A_1\rho_0A_2A_3\cdots A_n]$$

と書き直せる。

ここで(118)を使えば

$$\begin{aligned}a_{\boldsymbol{k}}(\tau)\rho_0&=\rho_0a_{\boldsymbol{k}}(\tau)\exp(\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}})\\a_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger(\tau)\rho_0&=\rho_0a_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger(\tau)\exp(-\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}})\end{aligned}\tag{122}$$

であるから

$$\langle A_2A_3\cdots A_nA_1\rangle=\langle A_1A_2\cdots A_n\rangle\exp(\pm\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}})$$

ただし複号は，+ は A_1 が消滅演算子のとき，− は生成演算子のときである。したがって

$$\begin{aligned}\dot{A}_1\dot{A}_j&=\frac{[A_1,\ A_j]_\pm}{1\mp\exp(-\beta\varepsilon_1)}\qquad(A_1\text{ が消滅演算子のとき})\\&=\frac{[A_1,\ A_j]_\pm}{1\mp\exp(\beta\epsilon_1)}\qquad(A_1\text{ が生成演算子のとき})\end{aligned}\tag{123}$$

とおけば**，(121)より

$$\begin{aligned}\langle A_1A_2\cdots A_n\rangle&=\dot{A}_1\dot{A}_2\langle A_3\cdots A_n\rangle\pm\dot{A}_1\dot{A}_3\langle A_2A_4\cdots A_n\rangle+\cdots\\&\quad+\dot{A}_1\dot{A}_n\langle A_2A_3\cdots A_{n-1}\rangle\end{aligned}\tag{124}$$

が得られる。以下 $\langle A_3\cdots A_n\rangle$ などに同様な手続きをすれば，(120)が得られる。

最後に(123)が(119)に一致することを示す。A_1 が消滅演算子のときは，A_j は生成演算子でなければ(123)も(119)も 0 になり，たしかに一致する。A_j が生成演算子のときは，$A_1=a_{\boldsymbol{k}}(\tau)$, $A_j=a_{\boldsymbol{k}'}{}^\dagger(\tau')$ とおくと，仮定より $\tau>\tau'$ であるから，(119)は

$$\begin{aligned}\langle\mathrm{T}_\tau[a_{\boldsymbol{k}}(\tau)a_{\boldsymbol{k}'}{}^\dagger(\tau')]\rangle&=\exp(-\tau\epsilon_{\boldsymbol{k}}+\tau'\epsilon_{\boldsymbol{k}'})\langle a_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}'}{}^\dagger\rangle\\&=\exp\{-(\tau-\tau')\epsilon_{\boldsymbol{k}}\}\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\left(1\pm\frac{1}{\exp(\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}})\mp1}\right)\\&=\exp\{-(\tau-\tau')\epsilon_{\boldsymbol{k}}\}\frac{1}{1\mp\exp(-\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}})}\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\end{aligned}\tag{125}$$

となり，(123)の $[A_i,\ A_j]_\mp$ は

---

* この式の複号は同順でさえあれば，どちらでもよい。

** 複号は上が Bose 系，下が Fermi 系である。

$$[a_{\boldsymbol{k}}(\tau),\ a_{\boldsymbol{k}'}{}^{\dagger}(\tau')]_{\mp}=\exp(-\tau\epsilon_{\boldsymbol{k}}+\tau'\epsilon_{\boldsymbol{k}'})[a_{\boldsymbol{k}},\ a_{\boldsymbol{k}'}{}^{\dagger}]_{\mp}$$
$$=\exp\{-(\tau-\tau')\epsilon_{\boldsymbol{k}}\}\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}$$

となるから両式は一致することがわかる。A_1 が生成演算子のときも同様である。

演習問題 5.

1. van der Waals の状態方程式(1)について，その臨界点における温度，圧力，体積を求めよ。

2. (9)式のクラスター積分で b_4 に現われるグラフをすべてかいてみよ。

3. ビリアル展開(16)式の次の項，つまり第三ビリアル係数を求めよ。

4. Bose 型演算子に対してもコントラクションを (65) 式で定義すると，$[A,\ B]=0$ のときは $AB=0$ になることを示せ。また Bose 粒子場 $\psi(x)$, $\psi^{\dagger}(x)$ に対しても (68), (69) 式が成立することを示せ。

5.
$$e^{S}Ae^{-S}=A+[S,\ A]+\frac{1}{2!}[S[S,\ A]]+\cdots$$

を用いて

$$a_{\boldsymbol{k}}(\tau)=e^{\tau H_0}a_{\boldsymbol{k}}e^{-\tau H_0}=a_{\boldsymbol{k}}e^{-\tau\epsilon_{\boldsymbol{k}}}\qquad \left(H_0=\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}}{}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}}\right)$$

になることを，Bose，Fermi 両系に対して示せ。

6. Green 関数

6-1 いろいろな Green 関数の定義

元来，Green 関数とは，数学的には次のように定義されたものである。x の関数 $f(x)$ に対する線形微分方程式

$$L\left(\frac{d}{dx}, x\right)f(x)=u(x) \tag{1}$$

があるとき，

$$LG(x, y)=\delta(x-y) \tag{2}$$

を満たす $G(x, y)$ を L の **Green 関数**という。これを用いれば(1)の解は

$$f(x)=\int G(x, y)u(y)dy \tag{3}$$

と表わされる。ただし $Lf=0$ を満たす一般解は含まず，(3)は $u=0$ のとき $f=0$ になるような特解である*。

変数が2個以上の場合も，同様に Green 関数が定義できるが，とくに $Lf=0$ が波動方程式の場合，$G(x, y)$ は y (x, y は空間の点と時刻を表わす)から出る波，または y に入る波の x での振幅を表わしており，波の**伝播関数**(propagator)とよばれることもある。

基底状態における Green 関数　これから用いる Green 関数は，上の数学的な定義とはやや異なり，Heisenberg 表示の演算子 $A(t)$, $B(t')$ に対して

$$G_{AB}(t, t')=-i\langle \mathrm{T}\,[A(t)B(t')]\rangle \tag{4}$$

で定義される。$\langle\cdots\rangle$ は基底状態における期待値である。

---

*　L の固有関数を f_i，固有値を λ_i とすると ($Lf_i=\lambda_i f_i$)，λ_i の中に 0 になるものがなければよい。

(4) の G_{AB} の満たす方程式をつくるには，$G_{AB}(t,t')$ を t で微分する。すると

$$i\frac{\partial}{\partial t}G_{AB}(t,t')+\frac{i}{\hbar}\langle \mathrm{T}\,[[A(t),\ H]B(t')]\rangle$$
$$=\delta(t-t')[A(t),\ B(t')]_{\mp} \qquad (5)$$

となり*，これは

$$i\frac{\partial A}{\partial t}+\frac{1}{\hbar}[H,\ A]=0$$

という Heisenberg の運動方程式の Green 関数に似た形をしている。

とくに $A=\psi(\boldsymbol{r})$, $B=\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}')$ と，場の演算子にとったものが重要な役割をするので，この場合の Green 関数を〔$\boldsymbol{r}$, t を $\boldsymbol{x}$, また $\boldsymbol{r}'$, t' を $\boldsymbol{x}'$ として〕単に $G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ と書くことにする。すると(5)の右辺は

$$\delta(t-t')[\psi(\boldsymbol{r}),\ \psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}')]_{\mp}=\delta(t-t')\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$

となる。また

$$\frac{1}{\hbar}[\psi(\boldsymbol{r}),\ H]=L\psi(\boldsymbol{r})$$

と書けば(ただし L は $\partial/\partial\boldsymbol{r}$ を含んでいる)，(5)は

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-L\right)G(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \qquad (6)$$

となり，Schrödinger 方程式

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-L\right)\psi(x)=0 \qquad (6')$$

の数学的な意味での Green 関数の形をしている。しかし一般に相互作用のある場合は，L は ψ について線形ではないので，厳密な意味では(1)に対する Green 関数とは異なっている。もし粒子間に相互作用がなければ，L は ψ について線形となり，(6′)は自由な波動場の方程式になる。そして(6) は $G(x,x')$ がその数学的な意味での Green 関数になっていることを示している。また相互作用がある場合でも

$$G(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')=-i\langle \mathrm{T}\,[\psi(\boldsymbol{x})\psi^{\dagger}(\boldsymbol{x}')]\rangle \qquad (7)$$

は，$\boldsymbol{x}'(=\boldsymbol{r}',\ t')$ で生じた粒子が，$\boldsymbol{x}(=\boldsymbol{r},\ t)$ で消えるまでのふるまいを表わしており，この意味で粒子の伝播関数という意味をもっている。

---

* 右辺の $[A,\ B]_{\mp}$ の $-$ は Bose 型の演算子，$+$ は Fermi 型の演算子の場合である。これは(4)で $\mathrm{T}[AB]=AB\theta(t-t')\mp BA\theta(t'-t)$ として，θ 関数を t で微分したときに現われる。

(5) の方程式を満たすものは (4) の G_{AB} とは限らず，たとえば次の関数も(5)を満たしている。

$$G^{\mathrm{R}}{}_{AB}(t,t')=-i\langle[A(t),\ B(t')]_{\mp}\rangle\theta(t-t') \tag{8 a}$$

$$G^{\mathrm{A}}{}_{AB}(t,t')=i\langle[A(t),\ B(t')]_{\mp}\rangle\theta(t'-t) \tag{8 b}$$

ただし複号は上が Bose 型，下が Fermi 型演算子に対するものである。G^{R} は $t<t'$ では 0 で，$t>t'$ でのみ 0 ではない。つまり t' におきたこと (B) が，それより後の時刻 t で A に与える影響を表わしており，**遅延 Green 関数** (retarded Green function) とよばれている。G^{A} はこれとは逆で**先進 Green 関数**(advanced Green function)とよばれている。(8 a, b) の G^{R}, G^{A} は，(4)の G と密接な関係にあり，これについては次節で述べることにする。

有限温度における Green 関数　以上は基底状態における Green 関数であり，0 K でのみ使える。有限温度では，基底状態における期待値のかわりに，密度演算子

$$\rho=e^{-\beta(H-\mu N)}/\Xi, \qquad \Xi=\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta(H-\mu N)}] \tag{9}$$

を使った平均値を使えばよい。この ρ を使った平均を

$$\mathrm{Tr}\,[\rho\cdots]=\langle\cdots\rangle \tag{10}$$

と表わせば，(8 a, b)と全く同じ式で $\mathscr{G}^{\mathrm{R}}$, $\mathscr{G}^{\mathrm{A}}$ が定義できる。

有限温度の G^{R}, G^{A} と数学的に密接な関係のあるものとしては, (4)の G そのままではなく，t, t' として虚数をとったものがある。つまり

$$A(\tau)=e^{\tau K/\hbar}Ae^{-\tau K/\hbar} \tag{11}$$

$$K=H-\mu N \tag{12}$$

として

$$\mathscr{G}_{AB}(\tau,\tau')=-\langle\mathrm{T}_{\tau}\,[A(\tau)B(\tau')]\rangle \tag{13}$$

を使うと便利なことが多い。これを**温度 Green 関数** (thermal Green function)とよぶ*。

6-2 Green 関数の性質

Green 関数がどのように使われるかを説明する前に，いろいろな Green 関数の性質の中で，ハミルトニアンの詳しい構造によらない一般的な性質

* この Green 関数は松原武生が初めて導入したものなので，Matsubara Green function とよぶことも多い。

について以下に述べておく。

a) 基底状態における Green 関数の性質

まず(7)の G, (8 a, b)の G^{R}, G^{A} の Fourier 変換を，(5·81)にならって次のように定義する。

$$G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,;\,t-t')=\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3\boldsymbol{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega G(\boldsymbol{k},\omega)e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')-i\omega(t-t')}$$
$$G^{\alpha}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,;\,t-t')=\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3\boldsymbol{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega G^{\alpha}(\boldsymbol{k},\omega)e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')-i\omega(t-t')} \tag{14}$$
$$(\alpha=A,B)$$

ただし系は並進対称性をもつものとして，G は $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$ のみの関数とした。以下でこの $G(\boldsymbol{k},\omega)$, $G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)$, $G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)$ の間の関係について調べる。

Fermi 粒子系　まず Fermi 粒子系を考えることにし，$G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,;\,t-t')$ の $t>t'$ での式を書き下してみる。

$$G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,;\,t-t')=-i\langle 0|e^{iHt/\hbar}\psi(\boldsymbol{r})e^{-iH(t-t')/\hbar}\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}')e^{-iHt'/\hbar}|0\rangle$$
$$=-i\sum_{s}\langle 0|\psi(\boldsymbol{r})|s\rangle\langle|\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}')|0\rangle e^{i(E_0-E_s)(t-t')/\hbar}$$

ただし粒子数 N の基底状態を $|0\rangle$，粒子数 $N+1$ の任意の状態を $|s\rangle$ と書き，それぞれのエネルギーを E_0, E_s と書いた。ここで

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

であるが，全運動量を表わす演算子

$$\boldsymbol{P}=\sum_{\boldsymbol{k}}\hbar\boldsymbol{k}a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}} \tag{15}$$

を用いると

$$e^{-i\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}a_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}=a_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{16}$$

になることから

$$\psi(\boldsymbol{r})=e^{-i\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}\psi(0)e^{i\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar} \tag{17}$$

と表わされる。さらに系が一様で並進対称性をもつこと，つまり

$$[H,\ \boldsymbol{P}]=0$$

であることから，H の固有状態 $|0\rangle$, $|s\rangle$ は $\boldsymbol{P}$ の固有関数であるように選べる。基底状態では全運動量は 0 であるから

$$\boldsymbol{P}|0\rangle=0$$
$$\boldsymbol{P}|s\rangle=\hbar\boldsymbol{k}_s|0\rangle$$

とすると，

$$\langle 0|\psi(\boldsymbol{r})|s\rangle=\langle 0|\psi(0)|s\rangle e^{i\boldsymbol{k}_s\cdot\boldsymbol{r}}$$
$$\langle s|\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')|0\rangle=\langle s|\psi^\dagger(0)|0\rangle e^{-i\boldsymbol{k}_s\cdot\boldsymbol{r}'} \tag{18}$$

となるので，

$$G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,;\,t-t')=-i\sum_s|\langle 0|\psi(0)|s\rangle|^2e^{i\boldsymbol{k}_s\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-i(E_s-E_0)(t-t')/\hbar}\qquad(t>t') \tag{19 a}$$

となる。同様にして $t<t'$ のときは

$$G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,;\,t-t')=i\sum_{s'}|\langle s'|\psi(0)|0\rangle|^2e^{-i\boldsymbol{k}_{s'}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{i(E_{s'}-E_0)(t-t')/\hbar}\qquad(t<t') \tag{19 b}$$

となることがわかる。(19 a, b) の $|s\rangle$ は粒子数 $N+1$, $|s'\rangle$ は $N-1$ の，固有状態であり，それぞれの粒子数のときの基底状態のエネルギーを $E_0(N+1)$, $E_0(N-1)$ と書くと，次のように書ける。

$$E_s-E_0=\{E_s-E_0(N+1)\}+\{E_0(N+1)-E_0(N)\}$$
$$\sim\{E_s-E_0(N+1)\}+\partial E_0/\partial N=\epsilon_s+\mu$$

ただし ϵ_s は粒子数 $N+1$ のときの励起エネルギー，μ は化学ポテンシャルである。同様にして

$$E_{s'}-E_0\simeq\epsilon_{s'}-\mu$$

であるから*，(19 a, b)をまとめて

$$G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,;\,t-t')=-i\{\sum_s|\langle 0|\psi(0)|s\rangle|^2e^{i\boldsymbol{k}_s\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-i(\epsilon_s+\mu)(t-t')/\hbar}\theta(t-t')$$
$$-\sum_{s'}|\langle s'|\psi(0)|0\rangle|^2e^{-i\boldsymbol{k}_{s'}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{i(\epsilon_{s'}-\mu)(t-t')/\hbar}\theta(t'-t)\} \tag{20}$$

となる。(20)の Fourier 変換をとるのに，時間 t については (5·88) を適用すると

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=(2\pi)^3\Big\{\sum_s|\langle 0|\psi(0)|s\rangle|^2\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_s)\frac{1}{\omega-(\epsilon_s+\mu)/\hbar+i\eta}$$
$$+\sum_{s'}|\langle s'|\psi(0)|0\rangle|^2\delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_{s'})\frac{1}{\omega+(\epsilon_{s'}-\mu)/\hbar-i\eta}\Big\} \tag{21}$$

で与えられることがわかる。そこで

$$A(\boldsymbol{k},\omega)=(2\pi)^3\sum_s|\langle 0|\psi(0)|s\rangle|^2\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_s)\delta(\omega-\epsilon_s/\hbar)$$
$$B(\boldsymbol{k},\omega)=(2\pi)^3\sum_s|\langle s'|\psi(0)|0\rangle|^2\delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_s)\delta(\omega-\epsilon_{s'}/\hbar) \tag{22}$$

* $\epsilon_{s'}$ は粒子数が $N-1$ の系での励起エネルギーである。ただし N は十分に大きいので，$\epsilon_s, \epsilon_{s'}$ のスペクトルには差がなく，粒子数 N の系のスペクトルと同じと考えてよい。

という関数を定義すると，(21)は

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=\int_0^\infty d\omega'\left\{\frac{A(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega-\omega'-(\mu/\hbar)+i\eta}+\frac{B(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega+\omega'-(\mu/\hbar)-i\eta}\right\} \tag{23}$$

と表わされることになる*。$A(\boldsymbol{k},\omega)$ は運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$, 励起エネルギー $\hbar\omega$ の励起状態(粒子数は $N+1$) の数，$B(\boldsymbol{k},\omega)$ は運動量 $-\hbar\boldsymbol{k}$, 励起エネルギー $\hbar\omega$ の励起状態(粒子数 $N-1$)の数を表わし，一種の状態密度である。

同様にして $G^{\mathrm{R}}, G^{\mathrm{A}}$ の Fourier 変換を求めると，

$$G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\int_0^\infty d\omega'\left\{\frac{A(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega-\omega'-(\mu/\hbar)+i\eta}+\frac{B(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega+\omega'-(\mu/\hbar)+i\eta}\right\} \tag{24 a}$$

$$G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)=\int_0^\infty d\omega'\left\{\frac{A(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega-\omega'-(\mu/\hbar)-i\eta}+\frac{B(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega+\omega'-(\mu/\hbar)-i\eta}\right\} \tag{24 b}$$

となることがわかる。

(24 a, b)を比べればすぐわかるように，A, B は実数なので

$$G^{\mathrm{R}*}(\boldsymbol{k},\omega)=G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega) \tag{25}$$

であり，また(5·89)を用いると次の関係式が成り立つことがわかる。

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\,G(\boldsymbol{k},\omega)&=\mathrm{Re}\,G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\mathrm{Re}\,G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)\\&=\int_0^\infty d\omega'\left\{\frac{P}{\omega-\omega'-(\mu/\hbar)}A(\boldsymbol{k},\omega')+\frac{P}{\omega+\omega'-(\mu/\hbar)}B(\boldsymbol{k},\omega)\right\}\end{aligned} \tag{26 a}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\,G(\boldsymbol{k},\omega)&=\mathrm{Im}\,G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=-\mathrm{Im}\,G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)\\&=-\pi A(\boldsymbol{k},\omega)\qquad(\hbar\omega>\mu)\end{aligned} \tag{26 b}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{Im}\,G(\boldsymbol{k},\omega)&=-\mathrm{Im}\,G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\mathrm{Im}\,G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)\\&=\pi B(\boldsymbol{k},\omega)\qquad(\hbar\omega<\mu)\end{aligned} \tag{26 c}$$

とくに $\mathrm{Re}\,G$ と $\mathrm{Im}\,G$ との間には次の関係式がある**。

$$\mathrm{Re}\,G(\boldsymbol{k},\omega)=\int_{-\infty}^\infty d\omega'\frac{P}{\omega'-\omega}\,\mathrm{Im}\,G(\boldsymbol{k},\omega)\,\mathrm{sgn}\{\omega-(\mu/\hbar)\} \tag{27}$$

また(23), (24 a, b)からわかるように，それぞれの Green 関数を ω の複素平面上に解析接続すると，G^{R}, G^{A} は次の関数 $\mathscr{G}(z)$ とそれぞれ上半面，下半面で一致する。

---

* この形をふつう**スペクトル表示**，または **Lehmann**(レーマン)**表示**とよんでいるが，実は H. Lehmann: Nouvo Cimeuto **11**, 342 (1954) より以前に，二，三の論文によって同じことが指摘されている。とくにその中の最初のものとして H. Umezawa and S. Kamefuchi: Prog. Theor. Phys. **6**, 543 (1951) をあげておくべきであろう。

** ある関数の実数部分と虚数部分をこのように関係づける式を**分散式**(dispersion formula)とよぶ。

$$\mathscr{G}(z)=\int_0^\infty\left\{\frac{A(\boldsymbol{k},\omega')}{z-\omega'}+\frac{B(\boldsymbol{k},\omega')}{z+\omega'}\right\}d\omega' \tag{28}$$

(28) の $\mathscr{G}(z)$ は実軸上を除いては全平面で解析関数であり，実軸を横切るとき不連続を示す。したがって G^{R}, G^{A} はそれぞれ上半面，下半面で解析的である。(23), (24 a, b) から G, G^{R}, G^{A} の $|\omega|\to\infty$ でのふるまいがわかる。実際 $|\omega|\to\infty$ では

$$G(\boldsymbol{k},\omega)\sim G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)\sim G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)\sim\frac{1}{\omega}\int_0^\infty d\omega'\{A(\boldsymbol{k},\omega')+B(\boldsymbol{k},\omega')\}$$

としてよいが，これの右辺は

$$\int d^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\langle 0|\{\psi(\boldsymbol{r})\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')+\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\}|0\rangle e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}=1$$

であることがわかる。したがって

$$G(\boldsymbol{k},\omega)\sim G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)\sim G^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)\sim 1/\omega \qquad (|\omega|\to\infty)$$

となる。

Bose 粒子系　0 K での Bose 粒子系を考えるときは，**5-9** で述べたように，ハミルトニアンとして

$$K=H-\mu N \tag{29}$$

を用い，K の中の a_0, $a_0^\dagger$ は c 数 $\sqrt{N_0}$ におきかえてよい。そこで考えるべき Green 関数としては，(5·93) の ϕ_1, $\phi_1^\dagger$ を用いて

$$G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}';\ t-t')=-i\langle 0|\mathrm{T}\,[\phi_1(\boldsymbol{r},t)\phi_1^\dagger(\boldsymbol{r}',t')]|0\rangle \tag{30}$$

をとる。(30) に対しても Fermi 系と同じ取り扱いができ，これの Fourier 変換は (21) と同様な表式で表わされる。ただし Fermi 系との差は (19 a) と (19 b)，または (20) の第一項と第二項の符号が同じことと，ハミルトニアンとして (29) を用いるため

$$\langle 0|\psi(\boldsymbol{r},t)|s\rangle=\langle 0|\psi(\boldsymbol{r})|s\rangle e^{-i(E_s-E_0-\mu)t}$$

と μ が余分につくことである。このため (21) の第二項の符号が逆になり，各項の分母の μ がなくなる。つまり

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=(2\pi)^3\left\{\sum_s|\langle 0|\psi(0)|s\rangle|^2\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_s)\frac{1}{\omega-(\epsilon_s/\hbar)+i\eta}\right.$$
$$\left.-\sum_{s'}|\langle s'|\psi(0)|0\rangle|^2\delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_{s'})\frac{1}{\omega+(\epsilon_{s'}/\hbar)-i\eta}\right\} \tag{31}$$

となる。G^{R}, G^{A} についても同様な式が得られる。

b） 有限温度における Green 関数の性質

温度 Green 関数　(13) で $A=\psi(\boldsymbol{r})$, $B=\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')$ とおいたときの 温度 Green 関数

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}', \tau-\tau')=-\langle \mathrm{T}_\tau [\psi(\boldsymbol{r},\tau)\psi^\dagger(\boldsymbol{r}',\tau')]\rangle \tag{32}$$

の性質を考える。以下で必要な τ, τ' の範囲は

$$0\leq\tau,\ \tau'\leq\beta\hbar$$

なので，$\tau-\tau'$ の範囲は

$$-\beta\hbar\leq\tau-\tau'\leq\beta\hbar \tag{33}$$

であるとしておく。

まず $\tau-\tau'>0$ のときと $\tau-\tau'<0$ のときの Green 関数の間にある関係を調べる。簡単のため $\tau-\tau'$ を改めて τ と書き，(32) を単に $G(\tau)$ と書く。すると(9), (10)を使えば

$$\mathscr{G}(\tau<0)=\mp\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta K}\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')e^{\tau K/\hbar}\psi(\boldsymbol{r})e^{-\tau K/\hbar}]/\Xi$$

であるが，

$$\mathrm{Tr}\,[ABC]=\mathrm{Tr}\,[CAB]=\mathrm{Tr}\,[BCA]$$

を使えば

$$\begin{aligned}\mathscr{G}(\tau<0)&=\mp\,\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta K}e^{(\beta+\tau/\hbar)K}\psi(\boldsymbol{r})e^{-(\beta+\tau/\hbar)K}\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')]/\Xi\\&=\pm\mathscr{G}(\tau+\beta\hbar>0)\end{aligned} \tag{34}$$

となる。ただし＋は Bose 系，－は Fermi 系である。つまり(33)の範囲内で，Bose 系の Green 関数は周期 β の周期関数であり，Fermi 系では符号を変えるという意味で反周期関数ということになる。そこで(33)の範囲内で，$\mathscr{G}(\tau)$ を Fourier 展開し

$$\mathscr{G}(\tau)=\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n e^{-i\omega_n\tau}\mathscr{G}(\omega_n) \tag{35}$$

$$\mathscr{G}(\omega_n)=\frac{1}{2}\int_{-\beta\hbar}^{\beta\hbar}e^{i\omega_n\tau}\mathscr{G}(\tau)d\tau \tag{36}$$

と書く。ただし

$$\omega_n=n\pi/\beta\hbar \tag{37}$$

で与えられる。ところで(36)の積分を $\int_{-\beta\hbar}^{0}$ と $\int_{0}^{\beta\hbar}$ の二つに分け，第一の積分では(34)を使って $\tau'=\tau+\beta\hbar$ とおくと

$$\mathscr{G}(\omega_n)=\frac{1}{2}\int_0^{\beta\hbar}d\tau e^{i\omega_n\tau}[\mathscr{G}(\tau)+e^{-i\omega_n\beta\hbar}\{\pm\mathscr{G}(\tau)\}]$$

となる。さらに(37)より

$$e^{-i\omega_n\beta\hbar}=\begin{cases}1 & (n=\text{偶数})\\-1 & (n=\text{奇数})\end{cases}$$

であることを使うと

$$\mathscr{G}(\omega_n)=\int_0^{\beta\hbar}d\tau e^{i\omega_n\tau}\mathscr{G}(\tau) \tag{38}$$

ただし

$$\omega_n=\begin{cases}2n\pi/\beta\hbar & \text{(Bose 系)}\\ (2n+1)\pi/\beta\hbar & \text{(Fermi 系)}\end{cases}$$

となる。つまり Bose 系では(37)で偶数の ω_n だけが，Fermi 系では奇数の ω_n のみが残ることになる。

遅延および先進 Green 関数のスペクトル表示 次に有限温度における遅延および先進 Green 関数 $\mathscr{G}^{\mathrm{R}}$, $\mathscr{G}^{\mathrm{A}}$ について考える。$\mathscr{G}^{\mathrm{R}}$ の具体的な形は

$$\begin{aligned}&\mathscr{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,;\,t-t')\\&=-i\theta(t-t')\,\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta K}\{\psi(\boldsymbol{r},t)\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}',t')\mp\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}',t')\psi(\boldsymbol{r},t)\}]/\Xi\\&=-i\theta(t-t')\frac{1}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}\{(n|\psi(\boldsymbol{r})|m)(m|\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}')|n)e^{i(K_n-K_m)(t-t')/\hbar}\\&\qquad\mp(n|\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}')|m)(m|\psi(\boldsymbol{r})|n)e^{-i(K_n-K_m)(t-t')/\hbar}\}\end{aligned} \tag{39}$$

と書ける。ただしここではハミルトニアンとして(12)の K を使っているので，その固有値を K_n, K_m, 固有関数を $|n)$, $|m)$ と書いた。前と同様に全運動量 $\boldsymbol{P}$ は K と可換であり，$|n)$, $|m)$ は $\boldsymbol{P}$ の固有関数であると考えてよい。そこで

$$\boldsymbol{P}|n)=\hbar\boldsymbol{k}_n|n)$$

と書くと，上の式は

$$\begin{aligned}&\mathscr{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,;\,t-t')\\&=-i\theta(t-t')\frac{1}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}\{|\langle n|\psi(0)|m\rangle|^2e^{i(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n)\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{i(K_n-K_m)(t-t')/\hbar}\\&\quad\pm|\langle m|\psi(0)|n\rangle|^2e^{-i(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n)\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-i(K_n-K_m)(t-t')/\hbar}\}\end{aligned}$$

となる。上式の第二項で n と m を入れかえると

$$\begin{aligned}\mathscr{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,;\,t-t')=-i\theta(t-t')\frac{1}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}(1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)})\\\times|\langle n|\psi(0)|m\rangle|^2e^{i(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n)\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-i(K_m-K_n)(t-t')/\hbar}\end{aligned}$$

とまとめられる。これの Fourier 変換は

$$\begin{aligned}\mathscr{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=(2\pi)^3\frac{1}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}|\langle n|\psi(0)|m\rangle|^2(1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)})\\\times\delta(\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n))\frac{1}{\omega-(K_m-K_n)/\hbar+i\eta}\end{aligned} \tag{40 a}$$

で与えられる。

$\mathscr{G}^{\mathrm{R}}$ と全く同様にして $\mathscr{G}^{\mathrm{A}}$ の Fourier 変換も求められ

$$\mathscr{G}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)=(2\pi)^3\frac{1}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}|\langle n|\psi(0)|m\rangle|^2(1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)})$$
$$\times\delta(\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n))\frac{1}{\omega-(K_m-K_n)/\hbar-i\eta} \tag{40 b}$$

となることがわかる。ここで

$$\rho(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{(2\pi)^3}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}|\langle n|\psi(0)|m\rangle|^2(1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)})$$
$$\times\delta(\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n))\cdot\delta(\omega-(K_m-K_n)/\hbar) \tag{41}$$

という関数を導入すると，(40 a, b)は

$$\mathscr{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\frac{\rho(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega-\omega'+i\eta} \tag{42 a}$$

$$\mathscr{G}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\frac{\rho(\boldsymbol{k},\omega')}{\omega-\omega'-i\eta} \tag{42 b}$$

と書けることがわかる。

(28)にならって

$$\mathscr{G}_1(z)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\rho(\boldsymbol{k},\omega')}{z-\omega'}d\omega' \tag{43}$$

という複素関数を考えると，$\mathscr{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)$, $\mathscr{G}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)$ を ω の複素平面へ解析接続した関数は，それぞれ上半面 ($\mathrm{Im}\,z>0$)，下半面 ($\mathrm{Im}\,z<0$) で $\mathscr{G}_1$ と一致している。$\mathscr{G}_1(z)$ は実軸を除いては全平面解析的で，実軸を横切るとき不連続を示す関数であるから，$\mathscr{G}^{\mathrm{R}}$, $\mathscr{G}^{\mathrm{A}}$ の解析接続関数は，それぞれ上半面，下半面で解析的である。

温度 Green 関数のスペクトル表示 同様な方法で温度 Green 関数 $\mathscr{G}$ の Fourier 変換を計算する。(38)により $\mathscr{G}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}';\tau-\tau')$ の $\tau-\tau'$ についての Fourier 変換を求めるには $\tau>\tau'$ での $\mathscr{G}$ だけ必要だから，$\tau>\tau'$ として

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}';\tau-\tau')$$
$$=-\frac{1}{\Xi}\,\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta K}\psi(\boldsymbol{r})e^{-(\tau-\tau')K/\hbar}\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r})e^{(\tau-\tau')K/\hbar}]$$
$$=-\frac{1}{\Xi}\sum_n\sum_m{}^{-\beta K_n}|\langle n|\psi(0)|m\rangle|^2e^{i(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n)\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{(\tau-\tau')(K_n-K_m)/\hbar}$$

となる。これの Fourier 変換は(38)を使って

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_l)$$
$$=-\frac{(2\pi)^3}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}|\langle n|\psi(0)|m\rangle|^2\delta(\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n))\frac{e^{i\omega_l\beta\hbar-\beta(K_m-K_n)}-1}{i\omega_l-(K_m-K_n)/\hbar}$$

$$=(2\pi)^3\frac{1}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}|\langle n|\psi(0)|m\rangle|^2\delta(\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n))\frac{1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)}}{i\omega_l-(K_m-K_n)/\hbar}$$

と計算できる。したがって(41)の $\rho(\boldsymbol{k},\omega)$ を使えば

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_l)=\int_{-\infty}^{\infty}d\omega'\frac{\rho(\boldsymbol{k},\omega')}{i\omega_l-\omega'} \tag{44}$$

と書け，(43)の $\mathscr{G}_1(z)$ とは

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)=\mathscr{G}_1(i\omega_n)$$

という関係にあることがわかる。

(44) と (41) から直ちに上の式を結論することは危険で，すべての $i\omega_n=in\pi/\beta\hbar$ で1になる関数がかかっていてもよい。そういう関数は実際に存在し，たとえば

$$f_m(z)=e^{mz\beta\hbar}\qquad\begin{cases}m=0,\ 1,\ 2,\cdots & (\text{Bose 系})\\ m=0,\ 2,\ 4,\cdots & (\text{Fermi 系})\end{cases}$$

がそうである。しかしすぐ後の議論からわかるように，$\mathscr{G}$ と $\mathscr{G}_1$ の無限遠点でのふるまいから，$m=0$，つまり $f_m=1$ でなければならないことがわかる。

$|\omega|$ または $|\omega_n|\to\infty$ のときの $\mathscr{G}^{\mathrm{R}}$, $\mathscr{G}^{\mathrm{A}}$, $\mathscr{G}$ のふるまいは，(42 a, b), (44) より

$$\mathscr{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)\sim\mathscr{G}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)\sim\frac{1}{\omega}\int_{-\infty}^{\infty}\rho(\boldsymbol{k},\omega')d\omega'$$

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)\sim\frac{1}{i\omega_n}\int_{-\infty}^{\infty}\rho(\boldsymbol{k},\omega')d\omega'$$

であることがわかるが，

$$\int_{-\infty}^{\infty}\rho(\boldsymbol{k},\omega')d\omega'=\int d^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\langle[\psi(\boldsymbol{r}),\ \psi^\dagger(\boldsymbol{r}')]_\mp\rangle$$
$$=1 \tag{45}$$

が証明できるので，$|\omega|$ または $|\omega_n|\to0$ で

$$\mathscr{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)\sim\mathscr{G}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)\sim\frac{1}{\omega},\qquad\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)\sim\frac{1}{i\omega_n} \tag{46}$$

となる。(46)と(43)を比べれば，$|\omega_n|\to\infty$ でのふるまいが一致するためには，(44)であることがわかる。

こうして $\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)$ は $\omega_n>0$ のときは $\mathscr{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)$ を上半面に解析接続したもの $\mathscr{G}_1(z)$ の $z=i\omega_n$ における値に等しく，$\omega_n<0$ のときは $\mathscr{G}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)$ の下半面へ解析接続したものの $i\omega_n$ における値に等しいことがわかった*。

* このように複素 ω 平面で，上半面では $\mathscr{G}^{\mathrm{R}}$ に，下半面では $\mathscr{G}^{\mathrm{A}}$ に等しい関数を **2 時間 Green 関数**(double time Green function)という。

6-3 Green 関数を使っての物理量の計算

非常に多くの物理量は，ふつうの表示では個々の粒子についての和として表わされる。第二量子化の形では

$$Q=\int d^3\boldsymbol{r}\psi^\dagger(\boldsymbol{r})q(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{47}$$

という形で表わされる。ただし $q(\boldsymbol{r})$ は $\boldsymbol{r}$ についての微分を含んでもよく，またスピン自由度があるときはスピン変数についての和を含むものとする。(47)の形をしたものの例として

$$\begin{aligned}&\text{全運動量} && \boldsymbol{P}=\int d^3\boldsymbol{r}\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)\psi(\boldsymbol{r})\\ &\text{全運動エネルギー} && T=\int d^3\boldsymbol{r}\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}\right)\psi(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{48}$$

などはなじみのものである。そのほか，(47)，(48)で $\int d^3\boldsymbol{r}$ を除いたものは，それぞれの量の密度とよばれるもので，たとえば

粒子数密度　$n(\boldsymbol{r})=\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})$

スピン密度　$\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{r})=\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\sigma}\psi(\boldsymbol{r})=\sum_{\alpha,\beta}\psi_\alpha{}^\dagger(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta}\psi_\beta(\boldsymbol{r})$

などである。ただし $\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ はスピン行列である。

(47)の基底状態での期待値，または統計力学的な平均値は

$$\langle Q\rangle=\int d^3\boldsymbol{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')q(\boldsymbol{r})\langle\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\rangle$$

という形で求められる。したがって 0 K での Green 関数 $G(\boldsymbol{r}t\,;\,\boldsymbol{r}'t')$，または温度 Green 関数 $\mathscr{G}(\boldsymbol{r}\tau\,;\,\boldsymbol{r}'\tau')$ を用いると

$$\langle Q\rangle=\pm i\int d^3\boldsymbol{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')q(\boldsymbol{r})\lim_{t'\to t+}G(\boldsymbol{r}t\,;\,\boldsymbol{r}'t') \tag{49 a}$$

または

$$\langle Q\rangle=\mp\int d^3\boldsymbol{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')q(\boldsymbol{r})\lim_{\tau'\to\tau+}\mathscr{G}(\boldsymbol{r}\tau\,;\,\boldsymbol{r}'\tau') \tag{49 b}$$

と表わされる。ただし $\lim_{t'\to t+}$ は t' を t より大きくとって t に近づける意味であり，$\lim_{\tau'\to\tau+}$ についても同様である。これを単に

$$\langle Q\rangle=\pm i\int d^3\boldsymbol{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')q(\boldsymbol{r})G(\boldsymbol{r}t\,;\,\boldsymbol{r}'t+) \tag{49'a}$$

または

$$\langle Q\rangle=\mp\int d^3\boldsymbol{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')q(\boldsymbol{r})\mathscr{G}(\boldsymbol{r}\tau\,;\,\boldsymbol{r}'\tau+) \tag{49'b}$$

と書くこともある。

これらの期待値または平均値を，Green 関数の Fourier 変換を使って表わしておいた方が便利なことが多い。(14)および(35)を使うと，(49′a, b)は

$$\langle Q\rangle=\pm i\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3\boldsymbol{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega G(\boldsymbol{k},\omega)e^{i\omega\eta}\int d^3\boldsymbol{r}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}q(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \qquad (\eta\to+0) \tag{50 a}$$

または

$$\langle Q\rangle=\mp\frac{1}{(2\pi)^4}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n\int d^3\boldsymbol{k}\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)e^{i\omega_n\eta}\int d^3\boldsymbol{r}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}q(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{50 b}$$

と表わされる。最後の積分は，q が $\partial/\partial\boldsymbol{r}$ を含むときは，それを $i\boldsymbol{k}$ でおきかえ，$\boldsymbol{r}$ については積分したものになっている。たとえば(48)の全運動量，全運動エネルギーの期待値は

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{P}\rangle&=\pm i\frac{\Omega}{(2\pi)^4}\int d^3\boldsymbol{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\hbar\boldsymbol{k}G(\boldsymbol{k},\omega)e^{i\omega\eta}\\ \langle T\rangle&=\pm i\frac{\Omega}{(2\pi)^4}\int d^3\boldsymbol{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m}G(\boldsymbol{k},\omega)e^{i\omega\eta}\end{aligned} \tag{51 a}$$

または

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{P}\rangle&=\mp\frac{\Omega}{(2\pi)^4}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n\int d^3\boldsymbol{k}\hbar\boldsymbol{k}\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)e^{i\omega_n\eta}\\ \langle T\rangle&=\mp\frac{\Omega}{(2\pi)^4}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n\int d^3\boldsymbol{k}\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m}\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)e^{i\omega_n\eta}\end{aligned} \tag{51 b}$$

で与えられる。また粒子数密度の期待値は

$$\langle n(\boldsymbol{r})\rangle=\pm i\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3\boldsymbol{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega G(\boldsymbol{k},\omega)e^{i\omega\eta} \tag{52 a}$$

または

$$\langle n(\boldsymbol{r})\rangle=\mp\frac{1}{(2\pi)^4}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n\int d^3\boldsymbol{k}\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)e^{i\omega_n\eta} \tag{52 b}$$

で与えられる。

相互作用エネルギー，全エネルギーの平均値　物理量が(47)の形に表わされている場合は，以上のように **6-1, 6-2** で述べた Green 関数を用いてその平均値(基底状態では期待値)が計算できるが，相互作用のエネルギー

$$V=\frac{1}{2}\iint d^3\boldsymbol{r}d^3\boldsymbol{r}'\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})$$

のように，場の演算子 4 個を含む場合には前の Green 関数だけでは計算できない。そのかわり，**2 体の Green 関数**

$$-i\langle \mathrm{T}\,[\psi(\boldsymbol{r}_1, t_1)\psi(\boldsymbol{r}_2, t_2)\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_3, t_3)\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_4, t_4)]\rangle$$

または

$$-\langle \mathrm{T}_\tau\,[\psi(\boldsymbol{r}_1, \tau_1)\psi(\boldsymbol{r}_2, \tau_2)\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_3, \tau_3)\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_4, \tau_4)]\rangle$$

の知識が必要になる*。

しかし，相互作用エネルギー，したがって全エネルギーの平均値を次のようにして求めることができる。まず Heisenberg 表示の場の演算子 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ を t について微分する。

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t}=e^{iHt/\hbar}[\psi(\boldsymbol{r}),\ H]e^{-iHt/\hbar} \tag{53}$$

であるが，

$$\begin{aligned}H&=T+V\\&=\int d^3\boldsymbol{r}\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right)\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}\psi(\boldsymbol{r})+\frac{1}{2}\iint d^3\boldsymbol{r}d^3\boldsymbol{r}'\\&\quad\times\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\end{aligned}$$

を用いると

$$[\psi(\boldsymbol{r}),\ H]=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}\psi(\boldsymbol{r})+\int d^3\boldsymbol{r}'\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})$$

と計算できる。したがって(53)は

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}\right)\psi(\boldsymbol{r}, t)=\int d^3\boldsymbol{r}'\psi^\dagger(\boldsymbol{r}', t)v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}', t)\psi(\boldsymbol{r}, t)$$

となる。この式の両辺に左から $\psi^\dagger(\boldsymbol{r}, t)$ を掛けて平均をとり，さらに $\boldsymbol{r}$ について積分をする。すると右辺は相互作用エネルギー V の平均値の 2 倍に等しくなるので

$$2\langle V\rangle=\int d^3\boldsymbol{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\lim_{t'\to t}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}\right)\langle\psi^\dagger(\boldsymbol{r}', t')\psi(\boldsymbol{r}, t)\rangle \tag{54}$$

となる。(54)の右辺は 1 体の Green 関数で表わされ

$$\langle V\rangle=\pm\frac{i}{2}\int d^3\boldsymbol{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}\right)G(\boldsymbol{r}t, \boldsymbol{r}'t+) \tag{55 a}$$

となる。または有限温度の場合は(53)で it を τ でおきかえ，H のかわりに $K=H-\mu N$ を使えばよいので

$$\langle V\rangle=\mp\frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}+\mu\right)\mathscr{G}(\boldsymbol{r}\tau, \boldsymbol{r}'\tau+) \tag{55 b}$$

と求められる。

---

* これに対し(14)，(32)は **1 体の Green 関数**とよばれる。

(55 a, b)を用いれば，全エネルギーの平均値もすぐに求められ

$$E=\langle H\rangle=\langle T\rangle+\langle V\rangle$$
$$=\pm\frac{i}{2}\int d^3\boldsymbol{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}\right)G(\boldsymbol{r}t,\boldsymbol{r}'t+) \tag{56 a}$$

または

$$E=\mp\frac{1}{2}\int d^3\boldsymbol{r}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\left(-\frac{\partial}{\partial\tau}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}-\mu\right)\mathscr{G}(\boldsymbol{r}\tau,\boldsymbol{r}'\tau+) \tag{56 b}$$

と表わされる。(56 a, b) を G および $\mathscr{G}$ の Fourier 変換を用いて表わすと，前と同様にして

$$E=\pm\frac{i}{2}\frac{\Omega}{(2\pi)^4}\int d^3\boldsymbol{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\left(\hbar\omega+\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)G(\boldsymbol{k},\omega)e^{i\omega\eta} \tag{57 a}$$

または

$$E=\mp\frac{1}{2}\frac{\Omega}{(2\pi)^4}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n\int d^3\boldsymbol{k}\left(\hbar\omega_n+\frac{\hbar^2k^2}{2m}-\mu\right)\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)e^{i\omega_n\eta} \tag{57 b}$$

と書き表わされる。

全エネルギーを1体 Green 関数で表わす別法　(56 a, b)，(57 a, b) で全エネルギーの平均値を1体 Green 関数で表わしたが，そこでは $\hbar\omega$ と $\hbar^2k^2/2m$ との和が入っている。これよりも $\hbar\omega$ と $\hbar^2k^2/2m$ との差で表わした方が便利なことが多いので，以下にその方法について述べる。

まず 0K の場合，ハミルトニアンにパラメータ λ を導入して

$$H(\lambda)=H_0+\lambda H_1 \tag{58}$$

とする。この $H(\lambda)$ の基底状態を $\Psi_0(\lambda)$, そのエネルギーを $E_0(\lambda)$ とすると

$$H(\lambda)\Psi_0(\lambda)=E_0(\lambda)\Psi_0(\lambda) \tag{59}$$
$$E_0(\lambda)=(\Psi_0(\lambda),\ H(\lambda)\Psi_0(\lambda)) \tag{60}$$

である。ただし $\Psi_0(\lambda)$ は規格化されており

$$(\Psi_0(\lambda),\ \Psi_0(\lambda))=1 \tag{61}$$

であるとする。(60)の両辺を λ で微分すると，(61)と(59)より $\Psi_0(\lambda)$ の微分は右と左で打ち消し合い

$$\frac{\partial E_0(\lambda)}{\partial\lambda}=\left(\Psi_0(\lambda),\ \frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}\Psi_0(\lambda)\right)$$
$$=\frac{1}{\lambda}(\Psi_0(\lambda),\ \lambda H_1\Psi_0(\lambda)) \tag{62}$$

となる。(58)より真のハミルトニアンは $\lambda=1$ で与えられるので，目的は $E_0(1)$ が必要である。そして $\lambda=0$ での $E_0(0)$ は H_0 の基底状態のエネルギーなので，(62)を積分して

$$E_0(1)-E_0(0)=\int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda}(\Psi_0(\lambda),\ \lambda H_1\Psi_0(\lambda)) \tag{63}$$

となる。ここで H_0 として運動エネルギー，H_1 として相互作用をとれば，H_1 の期待値は (55 a) で与えられている。ただしいまの場合，ハミルトニアンは(58)で与えられているので，このときの Green 関数を G_λ と書けば

$$\begin{aligned}E_0(1)&=E_0(0)\pm\frac{i}{2}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int d^3\boldsymbol{r}\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}\right)G_\lambda(\boldsymbol{r}t,\boldsymbol{r}'t+)\\&=E_0(0)\pm\frac{i}{2}\frac{\Omega}{(2\pi)^4}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int d^3\boldsymbol{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\omega\eta}\left(\hbar\omega-\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)G_\lambda(\boldsymbol{k},\omega)\end{aligned} \tag{64}$$

となり，たしかに $\hbar\omega$ と $\hbar^2k^2/2m$ との差の積分で与えられる。

有限温度のときは，(58) のハミルトニアンに対応する大きな状態和 Ξ_λ を考える。つまり

$$\Xi_\lambda=\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(K_0+\lambda H_1)}\right],\qquad K_0=H_0-\mu N \tag{65}$$

ここで

$$\Xi_\lambda=e^{-\beta\Phi_\lambda} \tag{66}$$

と書き($\Phi_{\lambda=1}$ は系の熱力学ポテンシャルとよばれる), (65)を λ で微分すると

$$\frac{\partial\Phi_\lambda}{\partial\lambda}=\frac{1}{\lambda}\langle\lambda H_1\rangle_\lambda \tag{67}$$

が得られる。ただし $\langle\cdots\rangle_\lambda$ は，(58) のハミルトニアンの下での熱力学的な平均値で

$$\langle\cdots\rangle_\lambda=\frac{1}{\Xi_\lambda}\mathrm{Tr}\left[\exp\{-\beta(K_0+\lambda H_1)\}\cdots\right]$$

で定義されるものである。(67)の $\langle\lambda H_1\rangle_\lambda$ は, H_1 として相互作用をとれば (55 b)によって Green 関数で表わされており，それを λ について 0 から 1 まで積分すれば，真の熱力学ポテンシャルの表式が得られる。

$$\begin{aligned}\Phi_{\lambda=1}&=\Phi_0\mp\frac{-1}{2}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int d^3\boldsymbol{r}\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}^2}+\mu\right)\mathscr{G}_\lambda(\boldsymbol{r}\tau,\boldsymbol{r}'\tau+)\\&=\Phi_0\mp\frac{1}{2}\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n\int d^3\boldsymbol{k}e^{i\omega_n\eta}\left(i\hbar\omega_n-\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\mu\right)\mathscr{G}_\lambda(\boldsymbol{k},\omega_n)\end{aligned} \tag{68}$$

系の熱力学ポテンシャル $\Phi(\Omega,T,\mu)$ が求まれば，熱力学的関係式

$$d\Phi=-SdT-pd\Omega-Nd\mu \tag{69}$$

を用いて，他の熱力学的な量はすべて計算できることになる。

$\mathscr{G}^{\mathrm{R}}$, $\mathscr{G}^{\mathrm{A}}$ と物理量の平均値 以上では物理量の平均値を温度 Green 関数 $\mathscr{G}$ を用いて表わしたが，同じことは遅延および先進 Green 関数 $\mathscr{G}^{\mathrm{R}}$, $\mathscr{G}^{\mathrm{A}}$ を用いてもできる。たとえば $\langle\psi^\dagger(\boldsymbol{r}',t')\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle$ を

$$\langle\psi^\dagger(\boldsymbol{r}',t')\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle=\frac{1}{(2\pi)^4}\int d^3\boldsymbol{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-i\omega(t-t')}F(\boldsymbol{k},\omega) \tag{70}$$

と Fourier 変換すると，(40 a, b) の計算と全く同様にして

$$F(\boldsymbol{k},\omega)=2\pi\rho(\boldsymbol{k},\omega)/(e^{\beta\hbar\omega}\mp 1) \tag{71}$$

となることが示される。ところで (42 a, b) より

$$\mathscr{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)-\mathscr{G}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)=-2\pi i\rho(\boldsymbol{k},\omega) \tag{72}$$

なので，

$$F(\boldsymbol{k},\omega)=i\{\mathscr{G}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)-\mathscr{G}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)\}/(e^{\beta\hbar\omega}\mp 1) \tag{73}$$

が得られる。あるいは(43)の 2 時間 Green 関数 $\mathscr{G}_1(z)$ を用いれば

$$F(\boldsymbol{k},\omega)=i\{\mathscr{G}_1(\omega+i\eta)-\mathscr{G}_1(\omega-i\eta)\}/(e^{\beta\hbar\omega}\mp 1) \tag{74}$$

と表わされる。

以上のことはもっと一般的に成り立つことで，二つの量 A, B の Green 関数を (8 a, b) のように定義し(ただし $\langle\cdots\rangle$ は熱力学的な平均)，それを $\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{R}}$, $\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{A}}$ と書くと

$$\langle B(t')A(t)\rangle=\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{-i\omega(t-t')}\{\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{R}}(\omega)-\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{A}}(\omega)\}\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}\mp 1} \tag{75}$$

と表わされることが容易に証明できる。こうして $\mathscr{G}^{\mathrm{R}}$, $\mathscr{G}^{\mathrm{A}}$ を用いれば，(70) や(75)のように，時間に依存する量の期待が直接計算できる点で便利である。

6-4 Green 関数に対する摂動展開

自由粒子の Green 関数 相互作用のない自由粒子の Green 関数は，すでに前章の Feynmann グラフの説明に登場したが，ここでその結果をまとめておく。まず 0 K の Green 関数は，Fermi 系では

$$G_0(\boldsymbol{r}t\,;\,\boldsymbol{r}'t')=-\frac{i}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}(t-t')}$$
$$\times\{\theta(k-k_{\mathrm{F}})\theta(t-t')-\theta(k_{\mathrm{F}}-k)\theta(t'-t)\} \tag{76}$$

$$G_0(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{1}{\omega-\omega_{\boldsymbol{k}}+i\eta\,\mathrm{sgn}(|\boldsymbol{k}|-k_{\mathrm{F}})} \tag{76'}$$

で与えられることは，(5·70)，(5·90)の通りである。同様にして $G_0{}^{\mathrm{R}}$, $G_0{}^{\mathrm{A}}$ は

$$G_0{}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}t\,;\,\boldsymbol{r}'t')=-\frac{i}{\Omega}\theta(t-t')\sum_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}(t-t')}$$
$$G_0{}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r}t\,;\,\boldsymbol{r}'t')=+\frac{i}{\Omega}\theta(t'-t)\sum_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}(t-t')} \tag{77}$$

$$G_0{}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=-\frac{i}{\omega-\omega_{\boldsymbol{k}}+i\eta}$$
$$G_0{}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)=+\frac{i}{\omega-\omega_{\boldsymbol{k}}-i\eta} \tag{77'}$$

になることは容易に確かめられるであろう。

次に Bose 系での Green 関数は(5·106), (5·107)で与えられている。

$$G_0(\boldsymbol{r}t\,;\boldsymbol{r}'t')=-i\langle\mathrm{T}\,[\psi_1(\boldsymbol{r}t)\psi^\dagger(\boldsymbol{r}'t')]\rangle$$
$$=\frac{-i}{\Omega}\theta(t-t')\sum_{\boldsymbol{k}\neq0}{}'e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}(t-t')} \tag{78}$$

$$G_0(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{-i}{\omega-\omega_{\boldsymbol{k}}+i\eta} \tag{78'}$$

$G_0{}^{\mathrm{R}}, G_0{}^{\mathrm{A}}$ も同様に求められ

$$G_0{}^{\mathrm{R}}=G_0$$
$$G_0{}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{r}t\,;\boldsymbol{r}'t')=+\frac{i}{\Omega}\theta(t'-t)\sum_{\boldsymbol{k}\neq0}{}'e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}(t-t')} \tag{79}$$

$$G_0{}^{\mathrm{A}}(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{i}{\omega-\omega_{\boldsymbol{k}}-i\eta} \tag{79'}$$

となることがわかる。

有限温度での自由粒子の温度 Green 関数は(5·125)から次のようになる。

$$\mathscr{G}_0(\boldsymbol{r}\tau\,;\,\boldsymbol{r}'\tau')=-\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-(\tau-\tau')\epsilon_{\boldsymbol{k}}/\hbar}\begin{cases}\dfrac{1}{1\mp e^{-\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}} & (\tau>\tau')\\[2ex] \dfrac{\pm e^{-\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}}{1\mp e^{-\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}} & (\tau<\tau')\end{cases} \tag{80}$$

$$\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k},\omega_n)=-\frac{1}{i\omega_n-\epsilon_{\boldsymbol{k}}/\hbar}$$
$$\omega_n=\begin{cases}2n\pi k_{\mathrm{B}}T/\hbar & (\text{Bose 系})\\ (2n+1)\pi k_{\mathrm{B}}T/\hbar & (\text{Fermi 系})\end{cases} \tag{80'}$$

Green 関数に対する摂動展開 相互作用のある系での Green 関数は正確に求めることは不可能なので，いろいろな近似が必要になる。その中でまず考えられるのは摂動計算である。以下でわかるように，摂動展開をするのに便利なのは，0 K での $G(\boldsymbol{r}t,\boldsymbol{r}'t')$ と温度 Green 関数 $\mathscr{G}(\boldsymbol{r}\tau\,;\,\boldsymbol{r}'\tau')$,

またはそれぞれの Fourier 変換なので，主としてこの二つの Green 関数の摂動展開を考える。

さて $G(x,x')$ $(x=\boldsymbol{r},t,\ x'=\boldsymbol{r}',t')$ は定義により

$$G(x,x')=-i\langle \mathrm{T}\,[\psi(x)\psi^{\dagger}(x')]\rangle$$

で与えられるが，これは相互作用表示を用いると(5·58)のように

$$G(x,x')=-i\frac{\langle \mathrm{T}\,[S\psi_{\mathrm{I}}(x)\psi_{\mathrm{I}}{}^{\dagger}(x')]\rangle_0}{\langle S\rangle_0} \tag{81}$$

と表わされる。ただし S は (5·57) で与えられ，$\langle\cdots\rangle_0$ は相互作用のないときの基底状態での期待値である。したがって **5–6** 以下の議論がそのまま適用でき，相互作用についての展開の各項は Feynmann グラフを使って表わすことができる。

また温度 Green 関数に対しても同様に

$$\begin{aligned}\mathscr{G}(x,x')&=-\langle \mathrm{T}_\tau\,[\psi(x)\psi^{\dagger}(x')]\rangle\\&=-\frac{\langle \mathrm{T}_\tau\,[U(\beta)\psi_{\mathrm{I}}(x)\psi_{\mathrm{I}}{}^{\dagger}(x')]\rangle_0}{\langle U(\beta)\rangle_0}\end{aligned} \tag{82}$$

と表わすことができる。ただし $\psi_{\mathrm{I}}(x)$, $\psi_{\mathrm{I}}{}^{\dagger}(x')$ は

$$\begin{aligned}\psi_{\mathrm{I}}(x)&=e^{\tau K_0/\hbar}\psi(\boldsymbol{r})e^{-\tau K_0/\hbar}\\\psi_{\mathrm{I}}{}^{\dagger}(x')&=e^{\tau' K_0/\hbar}\psi^{\dagger}(\boldsymbol{r}')e^{-\tau' K_0/\hbar}\end{aligned} \tag{83}$$

で定義される相互作用表示であり，$U(\beta)$ は(5·112)で定義されたものである。$\langle\cdots\rangle_0$ は (5·110) の $\langle\cdots\rangle$ と同じ意味であり，(82) の分子の T_τ は $U(\beta)$ 中の $H_1(\tau_j)$ と $\psi_{\mathrm{I}}(x)$, $\psi_{\mathrm{I}}{}^{\dagger}(x')$ の τ, τ' を同時に順序づける演算子である。(82) の展開の各項は，**5–10** の議論によればやはり Feynmann グラフで表わされる。

(81), (82) いずれの場合も，分子は $\psi_{\mathrm{I}}(x)\psi_{\mathrm{I}}{}^{\dagger}(x')$ につながったグラフとつながらないグラフからの寄与の積に書けるが，つながっていないグラフからの寄与は分母と全く同じになり，Green 関数はつながったグラフの寄与だけで書けることは，前節で述べた通りである。

Feynmann グラフをつくる規則(x 表示) (81) を Feynmann グラフを使って計算する規則は **5–7, 5–8** でまとめておいたが，(82) に対してここで改めておく。

相互作用の n 次の項に対して

i) n 個の相互作用に対して $x_i(=\boldsymbol{r}_i,\tau_i)$ と $x_i'(=\boldsymbol{r}_i',\tau_i')$ $(i=1,2,\cdots n)$ を結ぶ n 本の波線を引き，それぞれに

$$U(x_i-x_i')=V(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_i')\delta(\tau_i-\tau_i') \tag{84}$$

を対応させる。

ii) i)の $2n$ 個の点，および外から与えた点 x, x' を矢印のついた実線で結び，x' からは1本の実線が出，x には1本の実線が入るようにする。また内部の点 x_i, x_i' では1本の実線が入り，1本の実線が出ているようにする。こうしてできた図形は波線または実線でつながっているようにする。そして y から出て x に入る実線には，自由粒子の Green 関数 $\mathscr{G}_0(x, y)$ を対応させる。

iii) x_i, x_i' については4次元の積分 $\int d^3\boldsymbol{r}_i\int_0^{\beta\hbar}d\tau_i$ を行なう。

iv) 全体に $(-1)^n(\pm1)^P$ を掛ける。P は実線のみでできている閉曲線の数である。

v) 一つの Green 関数の中の τ と τ' とが等しいときは，$\mathscr{G}_0(\boldsymbol{r}\tau; \boldsymbol{r}'\tau+0)$ とする。

vi) 幾何学的に異なるあらゆるグラフについて和をとる。

Feynmann グラフをつくる規則(運動量表示) $\mathscr{G}$ の Fourier 変換 $\mathscr{G}(\boldsymbol{k}, \omega_n)$ に対しても同様な摂動展開をグラフで表わすことができ，そのときのグラフのつくり方と計算の規則は次のようになる。

相互作用の n 次の項について，

i) 上と同じように n 本の波線と $(2n+1)$ 本の矢印のついた実線によってつながったグラフをかき，各々の線に4次元運動量をもたせておく。そして一つの頂点での2本の実線と1本の波線の4次元運動量の出入りの代数和は0になるようにする。

ii) 運動量 $q=\boldsymbol{q}, \nu_n$ の波線には

$$U(q)=V(\boldsymbol{q}), \qquad q=(\boldsymbol{q}, \nu_n), \qquad \nu_n=\frac{2\pi}{\beta\hbar}n \quad (n=0, \pm1, \pm2, \cdots) \tag{85}$$

を対応させる。また運動量 $k=(\boldsymbol{k}, \omega_n)$ の実線には $\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k}, \omega_n)$ を対応させる。

iii) 全体に

$$\left(-\frac{1}{\beta\hbar^2}\frac{1}{(2\pi)^3}\right)^n(\pm1)^P$$

を掛ける。

iv) 独立な内部の運動量については積分および和をとる。

$$\int d^3\boldsymbol{k}\sum_{\omega_n}$$

注意 (85)の相互作用の振動数を ν_n として，$\pi/\beta\hbar$ の偶数倍のみをとればよいことは次のようにしてわかる。元来の積分は

$$\int_0^{\beta\hbar} d\tau_1 \int_0^{\beta\hbar} d\tau_1' \delta(\tau_1-\tau_1')\langle\cdots\psi^\dagger(\tau_1)\psi^\dagger(\tau_1')\psi(\tau_1')\psi(\tau_1)\cdots\rangle$$

という形をしているが，$\langle\cdots\rangle$ の中の $\psi^\dagger\cdots\psi$ は Wick の定理によって二つずつ対になって $\mathscr{G}_0$ で表わされる。この $\mathscr{G}_0$ を Fourier 展開しておくと，上式の τ_1, τ_1' 依存性は

$$\exp\{i(\omega_n-\omega_{n'})\tau_1+i(\omega_l-\omega_{l'})\tau_1'\}$$

という形をしているはずである。したがって上式の積分を実行すれば

$$\beta\delta_{\omega_n-\omega_{n'}+\omega_l-\omega_{l'}}$$

という結果になる。この結果は $\delta(\tau_1-\tau_1')$ を

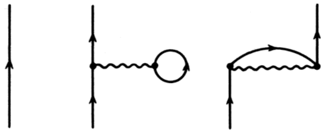
$$\delta(\tau_1-\tau_1')=\frac{1}{\beta\hbar}\sum_l e^{i\nu_l(\tau_1-\tau_1')} \tag{86}$$

とおいたときと同一であることがすぐにわかる。ただし Bose 系でも Fermi 系でも，振動数の差 $\omega_n-\omega_{n'}$, $\omega_l-\omega_{l'}$ はともに $\pi/\beta\hbar$ の偶数倍になっているので，(86) の ν_l としては

$$\nu_n=\frac{\pi}{\beta\hbar}\cdot 2n \qquad (n=0, \pm1, \pm2, \cdots)$$

をとればよいことがわかる。

例 ここで例として展開の初めの項の具体的な形を示しておく。相互作用の1次までのグラフは6·1図に示した三つだけである。これを上の規則に従って式で書くと次のようになる。



6·1 図

$$G(x,x')=G_0(x,x')+(\pm1)\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int G_0(x-x_1)U(x_1-x_2)$$
$$\times G_0(x_2-x_2)G_0(x_1-x')d^4x_1d^4x_2$$
$$+\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int G_0(x-x_1)U(x_1-x_2)G_0(x_1-x_2)$$
$$\times G_0(x_2-x')d^4x_1d^4x_2$$

$$G(\boldsymbol{k},\omega)=G_0(\boldsymbol{k},\omega)+\left(\frac{i}{\hbar}\right)G_0(\boldsymbol{k},\omega)\int\frac{d^4k_1}{(2\pi)^4}\{\pm U(0)G_0(\boldsymbol{k}_1,\omega_1)e^{i\omega_1\eta}$$
$$+U(k_1-k_2)G_0(\boldsymbol{k}_1,\omega_1)e^{i\omega_1\eta}\}G_0(\boldsymbol{k},\omega)$$

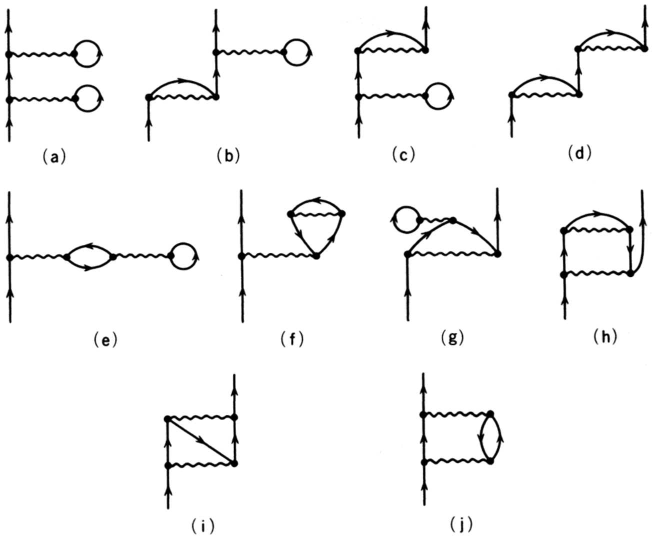
また温度 Green 関数は

$$\mathscr{G}(x,x')=\mathscr{G}_0(x-x')-\frac{1}{\hbar}\int\mathscr{G}_0(x-x_1)U(x_1-x_2)\mathscr{G}_0(x_2-x_2)$$
$$\times\mathscr{G}_0(x_1-x')d^4x_1d^4x_2\times(\pm1)$$

$$-\frac{1}{\hbar}\int \mathscr{G}_0(x-x_1)U(x_1-x_2)\mathscr{G}_0(x_1-x_2)$$
$$\times\mathscr{G}_0(x_2-x')d^4x_1d^4x_2$$

$$\mathscr{G}(\boldsymbol{k},\omega_n)=\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k},\omega_n)+\left(-\frac{1}{\hbar^2\beta}\right)\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k},\omega_n)\sum_{n'}\int\frac{d^3\boldsymbol{k}_1}{(2\pi)^3}\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k}_1,\omega_{n'})$$
$$\times\{\pm U(0)+U(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_1)\}\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k},\omega_n)$$

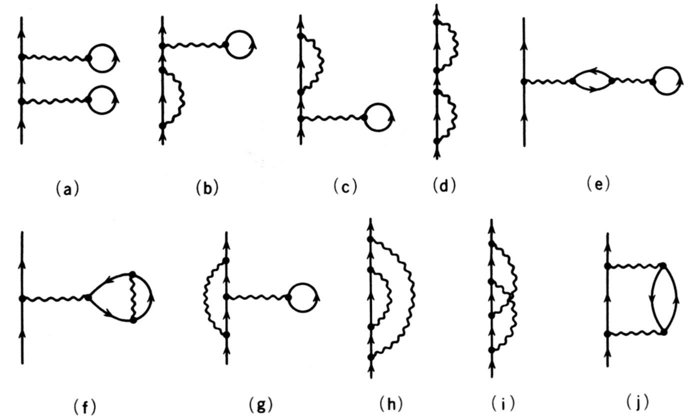
以下高次の項も複雑にはなるが，グラフを描き，対応する式を書き下すことによって求めることができる。たとえば相互作用の2次の項を表わすグラフは6·2図に示す10個である。



6·2 図

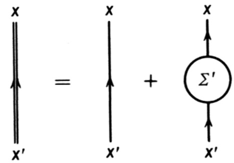
上のグラフでは，相互作用を表わす波線をすべて水平に描いていたが，むしろわかりにくくなる場合もあるので，その場合は波線を曲げて描くことにする。たとえば6·2図は6·3図のように描く。とくに (g), (h), (i) のグラフがわかりやすくなったであろう。

自己エネルギー部分　以上の議論からわかるように Green 関数 $G(x, x')$ または $\mathscr{G}(\dot{x}, x)$ の摂動展開をグラフに表わすと一般に次のような形をしている。まず x' から出た1本の実線が途中で何回か相互作用しながら進み，



6·3 図

最後に x で終わっている。そこで相互作用が含まれている部分を Σ' と書き，グラフで 6·4 図のように表わす。これの左辺の太い実線は G または $\mathscr{G}$ を表わし，右辺の第一項は相互作用がないときの Green 関数 G_0 または $\mathscr{G}_0$ であり，相互作用は第二項の Σ' の中にいろいろな形で含まれている。これを式で書くと



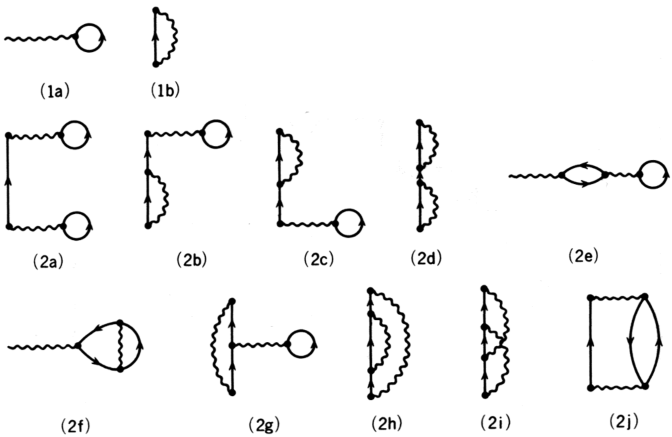
6·4 図

$$G(x, x')=G_0(x, x')+\int G_0(x, x_1)\Sigma'(x_1, x_1')G_0(x_1', x')d^4x_1d^4x_1'$$

となる。$\mathscr{G}(x, x')$ についても同様である。

さてこの Σ' の中にはいろいろなグラフが含まれている。相互作用の 2 次までの範囲でも，6·5 図のように 12 個のグラフがある。このうち (2 a)～(2 d) の図形は二つの相互作用が完全に分離され，中途を 1 本の実線がつないでいる。もっと高次になれば，このように途中で 1 本の実線になっている図形がたくさん現われ，また何回も実線 1 本になるようなグラフが現われる。そこで Σ' の中で，どの実線を 1 本だけ切っても二つの部分に分かれないような図形の和を Σ と書くことにすると，Σ' は Σ のくり返しとして次式のように表わされることになる。

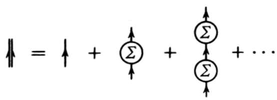
$$\textcircled{\Sigma'} = \textcircled{\Sigma} + \textcircled{\Sigma}\!\rightarrow\!\textcircled{\Sigma} + \textcircled{\Sigma}\!\rightarrow\!\textcircled{\Sigma}\!\rightarrow\!\textcircled{\Sigma} + \cdots \tag{87}$$



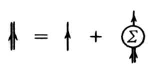
6·5 図

この Σ を**自己エネルギー部分**(self-energy part)という*。

6·4 図と(87)を組み合わせると



となるが，これはまた



(88)

と書ける。(88)は ∥ つまり $G(x, x')$ に対する積分方程式で，具体的には

$$G(x, x') = G_0(x, x') + \int G_0(x, x_1') \Sigma(x_1, x_1') G(x_1', x') d^4x_1 d^4x_1' \tag{89}$$

という形をしている。

系のハミルトニアンが時間を含まず，また並進対称のときは，G_0, Σ, G はすべてその変数の差だけの関数であり，(89) は Fourier 変換を用いると容易に解ける。つまり(89)は

$$G(\boldsymbol{k}, \omega) = G_0(\boldsymbol{k}, \omega) + G_0(\boldsymbol{k}, \omega) \Sigma(\boldsymbol{k}, \omega) G(\boldsymbol{k}, \omega) \tag{90}$$

---

* 場の量子論では**質量演算子**(mass operator)とよぶこともある。

となり，これの解は

$$G^{-1}(\boldsymbol{k},\omega)=G_0^{-1}(\boldsymbol{k},\omega)-\Sigma(\boldsymbol{k},\omega) \tag{91}$$

と書ける。つまり自己エネルギー部分 $\Sigma(\boldsymbol{k},\omega)$ が計算できれば，Green 関数が直ちに求められることになる。以上のことは温度 Green 関数に対してもそのまま成り立ち，(90)，(91) で ω を ω_n に書きかえればよいだけである。(91)の G_0^{-1} は，(76′)より

$$G_0^{-1}(\boldsymbol{k},\omega)=\omega-\omega_{\boldsymbol{k}}+i\eta\,\mathrm{sgn}\,(|\boldsymbol{k}|-k_{\mathrm{F}})$$

という形をしている。ω 平面で G_0 の極は $\omega=\omega_{\boldsymbol{k}}$ (1粒子のエネルギー)にあったが，G の極は

$$\omega(\boldsymbol{k})-\omega_{\boldsymbol{k}}-\Sigma(\omega(\boldsymbol{k}),\boldsymbol{k})=0 \tag{92}$$

できまる $\omega(\boldsymbol{k})$ にある。$\omega(\boldsymbol{k})$ は一般に実数とは限らないが，これがもし十分に実軸に近ければ，その実数部分が系に粒子を1個つけ加えるか取り去るために必要なエネルギーを表わしている。(92) は Σ が1粒子エネルギー $\omega_{\boldsymbol{k}}$ への補正になっていることを示しており，これが Σ を自己エネルギーとよぶ理由である*。以上は 0 K における Green 関数について話を進めてきたが，(91)の ω を $i\omega_n$〔$\omega_n=\pi l/\beta\hbar$, $l=$偶数(Bose 粒子)，奇数(Fermi 粒子)〕と書き直せば，温度 Green 関数についてもそのまま定義される。

系の全エネルギー E または熱力学ポテンシャル Φ を，1体の Green 関数を用いて表わした式(64)および(68)は自己エネルギー部分 Σ を用いると次のように表わされる。まず(64)で

$$G_\lambda(\boldsymbol{k},\omega)=1\bigg/\left\{\omega-\frac{\hbar}{2m}k^2-\Sigma_\lambda(\boldsymbol{k},\omega)\right\} \tag{93}$$

を代入すれば，

$$E_0=E_{00}\pm\frac{i}{2}\frac{\Omega}{(2\pi)^4}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\int d^3\boldsymbol{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\omega\eta}\hbar\Sigma_\lambda(\boldsymbol{k},\omega)G_\lambda(\boldsymbol{k},\omega) \tag{94}$$

となることはすぐにわかる。また(68)も同様にして

$$\Phi=\Phi_0\mp\frac{\Omega}{2(2\pi)^3}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n\int d^3\boldsymbol{k}e^{i\omega_n\eta}\hbar\Sigma_\lambda(\boldsymbol{k},\omega_n)\mathscr{G}_\lambda(\boldsymbol{k},\omega_n) \tag{95}$$

となることが示される**。(95)を導出するとき $\sum_n e^{i\omega_n\eta}$ という和を含む項が

---

* 場の量子論では，エネルギーは質量で表わされるので，Σ を質量演算子とよぶ(前頁脚注参照)。

** この両式が Σ だけの積分で書かれることが，(64) または(68) が (57 a) または (57 b) よりも計算に便利な理由である。

現われるが，これが0になることは幾何級数の和をとってみればわかる。

演習問題 6.

1. (8a), (8b)式の $G_{AB}{}^{\mathrm{R}}$, $G_{AB}{}^{\mathrm{A}}$ が満たす方程式を求めよ。

2. (13)式の温度 Green 関数 $\mathscr{G}_{AB}(\tau, \tau')$ が満たす方程式を求めよ。

3. (16), (17)式を証明せよ。

4. (24 a), (24 b)式を証明せよ。

5. (22)式の $A(\boldsymbol{k}, \omega)$, $B(\boldsymbol{k}, \omega)$ に対して次式となることを示せ。

$$\int_0^\infty d\omega\{A(\boldsymbol{k}, \omega)+B(\boldsymbol{k}, \omega)\}=1$$

6. (45)式を証明せよ。

7. (67)式を証明せよ。

8. (75)式を直接証明せよ。

9. (80), (80′)式を証明せよ。

10. (94), (95)式を導出せよ。

7. Green 関数に対する Feynmann グラフの応用

7-1 Hartree-Fock 近似

6 章で述べたように，Green 関数を求めるにはその自己エネルギー Σ が計算できればよい。Σ は(6·89)式，すなわち

$$G(x, x')=G_0(x, x')+\int G_0(x, x_1)\Sigma(x_1, x_1')G(x_1', x')d^4x_1d^4x_1' \qquad (1)$$

で定義されるものであるが，この Σ として一番簡単なグラフ，つまり 7·1 図に示したものだけをとることにする。ただしこの図に現われる Green 関数は自由粒子のものではなく，相互作用を含んだ真の Green 関数 G であり，したがってこの Σ を含んでいるものとする。すなわち Σ は G によってきまり，G はまた Σ を含むから，Σ と G との連立方程式になる。または Σ と G を矛盾なく (self-consistent に) きめるといってもよい。すると，この近似は 4 章で述べた Hartree-Fock 近似になることが以下のように示される。



7·1 図

まず 7·1 図の自己エネルギーを前章で述べた規則に従って書き表わす。

$$\Sigma(x_1, x_1')=-\frac{i}{\hbar}2\delta(x_1-x_1')\int U(x_1-x_2)G(x_2, x_2)d^4x_2$$
$$+\frac{i}{\hbar}U(x_1-x_1')G(x_1, x_1') \qquad (2)$$

ただし第一項の 2 という因子は，図の (a) では，閉曲線をつくっている粒子のスピンの向きが任意なので，スピンについての和から生じたものである。ここで(5·60)，すなわち

$$U(x-x')=v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta(t-t') \qquad (3)$$

を考慮すれば，(2)は

$$\Sigma(x_1, x_1') = -\frac{i}{\hbar}\delta(t_1-t_1')\Big\{2\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_1')\int v(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)G(\boldsymbol{r}_2t_1, \boldsymbol{r}_2t_1+0)d^3\boldsymbol{r}_2 \\ -v(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_1')G(\boldsymbol{r}_1t, \boldsymbol{r}_1't+0)\Big\} \qquad (4)$$

となることがわかる。

さて系のハミルトニアンは

$$H = H_0 + H_1$$

$$H_0 = \int \psi^*(\boldsymbol{r})h(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}$$

$$H_1 = \frac{1}{2}\iint \psi^*(\boldsymbol{r})\psi^*(\boldsymbol{r}')v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}d^3\boldsymbol{r}'$$

で与えられているものとすると，自由粒子の Green 関数 G_0 は

$$\Big\{i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{\hbar}h(\boldsymbol{r})\Big\}G_0(x, x') = \delta(x-x') \qquad (5)$$

を満たしている。同様にここの近似での $G(x, x')$ の満たす方程式を考えると，次のようになることがわかる。

$$i\frac{\partial}{\partial t}G(x, x') - \frac{1}{\hbar}\int d^3\boldsymbol{r}_1 h_{\rm eff}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1)G(\boldsymbol{r}_1t, x') = \delta(x-x') \qquad (6)$$

$$h_{\rm eff}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1) = \delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)h(\boldsymbol{r}_1) + \hbar\Sigma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1) \qquad (7)$$

ただし(4)の $\Sigma(x_1, x_1')$ で $\delta(t_1-t_1')$ を除いたものを $\Sigma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1')$ と書いた。つまり

$$\Sigma(x, x_1) = \delta(t-t_1)\Sigma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1)$$

(6)が正しいことは G に(1)を代入し(5)を使えば容易に示される。

ここで $h_{\rm eff}$ の固有値と固有関数を ϵ_j, φ_j とする。すなわち

$$\int d^3\boldsymbol{r}_1 h_{\rm eff}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1)\varphi_j(\boldsymbol{r}_1) = \epsilon_j\varphi_j(\boldsymbol{r}) \qquad (8)$$

すると $G(x, x')$ の時間についての Fourier 変換 $G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; \omega)$ は

$$G(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'; \omega) = \sum_j \varphi_j(\boldsymbol{r})\varphi_j^*(\boldsymbol{r}')\Big\{\frac{\theta(\epsilon_j-\epsilon_{\rm F})}{\omega-\epsilon_j/\hbar+i\eta} + \frac{\theta(\epsilon_{\rm F}-\epsilon_j)}{\omega-\epsilon_j/\hbar-i\eta}\Big\}$$

と表わされ，これを(4)に代入すると

$$\hbar\Sigma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\int v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)n(\boldsymbol{r}_1)d^3\boldsymbol{r} \\ -v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\sum_j \varphi_j^*(\boldsymbol{r}')\varphi_j(\boldsymbol{r})\theta(\epsilon_{\rm F}-\epsilon_j) \qquad (9)$$

となる。ただし

$$n(\boldsymbol{r}) = 2\sum_j |\varphi_j(\boldsymbol{r})|^2\theta(\epsilon_{\rm F}-\epsilon_j) \qquad (10)$$

は点 $\boldsymbol{r}$ における粒子数密度である。(9) の Σ を (7) に代入すれば，これが (4·8) の左辺の演算子と一致すること，つまり (8) が (4·8) と同じになることがすぐわかり，こうしてこの近似が Hartree-Fock 近似に一致することが示された。

7-2 剛体球の取り扱い(はしご近似)

原子や分子の間には，非常に近距離になるときわめて大きな反発力が働く*。これは粒子が有限の大きさをもつことを表わし，たとえば二つの剛体球は接したときに非常に大きな反発力が働き，それ以上には近づけないことに対応している。これはある距離以下での相互作用が無限に大きくなることを意味する。つまり相互作用ポテンシャル $v(r)$ は r がある距離 a 以下で無限大になる。このような相互作用をもった粒子系では，相互作用を摂動としたこれまでの取り扱いは適用できない。実際に $v(r)$ の Fourier 変換 $v(\boldsymbol{q})$ は存在しない。こういう剛体球 (hard sphere) 的な相互作用を取り扱う一つの方法は，まず相互作用として $r\leq a$ でも有限な大きさ v_0 をもっているものとしていろいろな量を計算した後，計算結果において $v_0\to\infty$ の極限をとることである。しかしいままでの単純な計算法では，この方法をとったとしても，最終結果は $v_0\to\infty$ で発散してしまうので，以下でこの極限で収束する結果を与える近似を考える。

2粒子の散乱 質量 m の2粒子の相対座標を $\boldsymbol{r}$，相互作用を $v(\boldsymbol{r})$ とすると，2粒子の相対運動の Schrödinger 方程式は

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{m}\nabla^2+v(\boldsymbol{r})\right\}\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r})$$

であるが，$E=\hbar^2k^2/m$，$v(\boldsymbol{r})=(\hbar^2/m)u(\boldsymbol{r})$ と書くと

$$(\nabla^2+k^2)\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})=u(\boldsymbol{r})\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) \tag{11}$$

となる。これを $|\boldsymbol{r}|=r$ の十分大きい所では入射波と散乱波からできているという条件下で，すなわち

$$\psi_k(r)\sim e^{ikz}+f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r} \qquad (r\to\infty) \tag{12}$$

という形になるように解いて，そのときの $f(\theta)$ をきめることが散乱の問題である。この $f(\theta)$ を**散乱振幅**(scattering amplitude)というが，$f(\theta)$ がわかれば散乱の微分断面積は $|f(\theta)|^2$ に比例するものとしてすぐに求まる。

---

* 2原子(または分子)内の電子の波動関数が重なり合うようになると Pauli 原理によって波動関数の形が変わるため，エネルギーは急激に増加する。これが強い反発力の原因である。

$f(\theta)$ は次のようにして求められる。まず(11)を積分方程式の形にする。左辺の演算子の Green 関数を $G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$, つまり

$$(\nabla^2+k^2)G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{13}$$

とすると，(11)の解で $r\to\infty$ で(12)の形になるものは

$$\psi_k(\boldsymbol{r})=e^{ikz}+\int G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')u(\boldsymbol{r}')\psi_k(\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}' \tag{14}$$

と書ける。(13)の G で点 $\boldsymbol{r}'$ から外へ出ていく波を表わすものは

$$G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{15}$$

で表わされるので，(14)の $r\to\infty$ での漸近形は

$$\psi_k(\boldsymbol{r})\sim e^{ikz}-\frac{e^{ikr}}{4\pi r}\int e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'}u(\boldsymbol{r}')\psi_k(\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}' \tag{16}$$

となることは容易に確かめられる。ただし $\boldsymbol{k}'=k\boldsymbol{r}/r$ は，大きさ k で $\boldsymbol{r}$ 方向を向いた波数ベクトルである。(16)を(12)と比較すれば

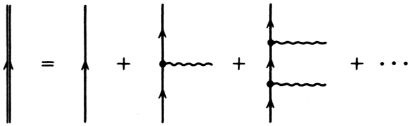
$$f(\theta)\simeq f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})=-\frac{1}{4\pi}\int e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'}u(\boldsymbol{r}')\psi_k(\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}' \tag{17}$$

となることがわかる。

(14)を相互作用について展開すると，$\psi_k{}^0(\boldsymbol{r})=e^{ikz}$ として

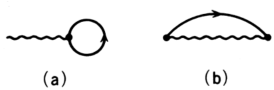
$$\psi_k(\boldsymbol{r})=\psi_k{}^0(\boldsymbol{r})+\int G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')u(\boldsymbol{r}')\psi_k{}^0(\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}'+\iint GuGu\psi_k{}^0d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2+\cdots \tag{18}$$

となるが，ここで $u(\boldsymbol{r})$ が $\boldsymbol{r}$ の小さい所で∞になるとすると，(18)の各項は発散してしまう。しかし(14)ではそのようなことはない。それは $u(\boldsymbol{r}')\to\infty$ になる所では $\psi_k(\boldsymbol{r}')=0$ になっているためであるが，(18) でいえば各項は発散しても，全部の和をとった後では発散しないことになる。この(18)の和をグラフで表わしたものが7·2図である。

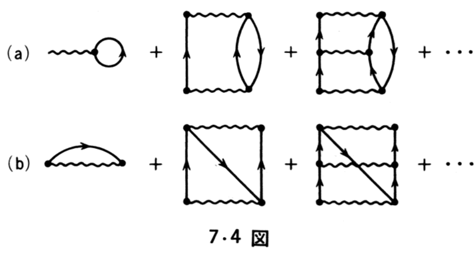


7·2 図

はしご近似　以上の話から，剛体球のような相互作用を取り扱うには，7·2図のように2個の粒子が何回もくり返し相互作用をすることをまとめればよい。そこで自己エネルギー部分 Σ に対する最も粗い近似として，摂動の1次の項の7·3図に示したグラフに対して，7·4図に示す項の和をとることにする。

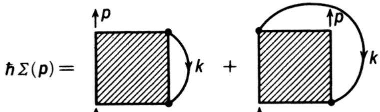


7·3 図



7·4 図

こういう項だけを集める近似を，グラフが〰〰でできた はしごに似ていることから**はしご近似** (ladder approximation) とよぶ。



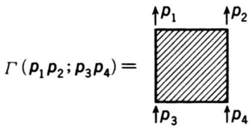
7・5 図　バーテックス部分と自己エネルギー

7・4 図は一般に Σ が 7・5 図のような形で表わされていることを暗示している。

式で書けば

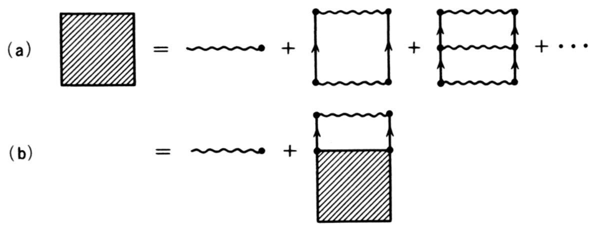
$$\hbar\Sigma(p)=-2i\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}G_0(k)\Gamma(pk,pk)+i\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}G_0(k)\Gamma(pk,kp)\quad(19)$$

ただし 7・6 図のように 2 個の粒子 p_3, p_4 が入ってきて，p_1, p_2 の粒子が出ていくまでにいろいろな相互作用をするグラフの和を $\Gamma(p_1p_2;p_3p_4)$ と書いた。これを一般に**バーテックス部分** (vertex part) とよんでいる。



7・6 図　バーテックス部分

このバーテックス部分は，はしご近似では 7・7 図 (a) のようなグラフの和であり，また同図(b)のように積分方程式の形になる。



7・7 図　バーテックス部分のはしご近似

式で書くと

$$\Gamma(p_1p_2;p_3p_4)=U(p_1-p_3)+\frac{i}{\hbar}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}U(k)G_0(p_1-k)G_0(p_2+k)$$
$$\times U(p_1-p_3-k)+\cdots$$
$$=U(p_1-p_3)+\frac{i}{\hbar}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}U(k)G_0(p_1-k)G_0(p_2+k)$$
$$\times\Gamma(p_1-k,p_2+k;p_3p_4)\qquad(20)$$

である。

(20)を解くには次のようにする。まず Γ を

$$\Gamma=\int\frac{d^4q}{(2\pi)^4}U(q)Q(p_1-q,p_2+q;p_3p_4) \tag{21}$$

という形に仮定すると，Q は次の方程式を満たす。

$$Q(p_1p_2;p_3p_4)=(2\pi)^4\delta^{(4)}(p_1-p_3)+\frac{i}{\hbar}G_0(p_1)G_0(p_2)$$
$$\times\int\frac{d^3k}{(2\pi)^4}U(k)Q(p_1-k,p_2+k;p_3p_4) \tag{22}$$

ところで相互作用は4次元運動量を保存するから，Γ も Q も $p_1+p_2=p_3+p_4$ が成り立つ所以外では0になる。そこで

$$p_1+p_2=p_3+p_4=P,\quad p_1-p_2=2p,\quad p_3-p_4=2p'$$

とおき，Γ, Q を P, p, p' の関数と考える。すると(22)は

$$Q(p,p';P)=(2\pi)^4\delta^{(4)}(p-p')+\frac{i}{\hbar}G_0\left(\frac{1}{2}P+p\right)G_0\left(\frac{1}{2}P-p\right)$$
$$\times\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}U(k)Q(p-k,p';P) \tag{23}$$

となる。さらに相互作用 v は空間座標だけの関数であり，

$$U(x-x')=v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta(t-t')$$

と定義したことを思い出せば，$U(p)$ は時間に対する振動数にはよらず

$$U(k)=v(\boldsymbol{k})$$

であるので，(23)は振動数で積分できる。つまり p の第四成分 p_0 で積分して

$$\chi(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)=\int\frac{dp_0}{2\pi}Q(pp';P) \tag{24}$$

とおくと*,

$$\chi(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)=(2\pi)^3\delta^{(3)}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')+\frac{i}{\hbar}\int\frac{dp_0}{2\pi}G_0\left(\frac{1}{2}P+p\right)G_0\left(\frac{1}{2}P-p\right)$$
$$\times\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}v(\boldsymbol{k})\chi(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}';P) \tag{25}$$

となる。これから χ がわかればバーテックス部分 Γ は

$$\Gamma(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)=\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}v(\boldsymbol{k})\chi(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}';P) \tag{26}$$

と求められ，p, p' の第四成分にはよらなくなることがわかる。また自己エネルギー部分 Σ は

---

* χ が p' の第四成分によらなくなることは(25)からすぐにわかる。

$$\hbar\Sigma(p)=-2i\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}G_0\left(\frac{1}{2}P-k\right)\Gamma(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k};P)$$
$$+i\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}G_0\left(\frac{1}{2}P-k\right)\Gamma(-\boldsymbol{k},\boldsymbol{k},P) \qquad (27)$$

から求めることができる。

(25)の積分核の計算 (25)をこのまま解くのは困難なので，真空中における二つの粒子の散乱の知識を使って近似的に解くことを考える。それにはまず

$$\frac{i}{\hbar}\int\frac{dp_0}{2\pi}G_0\left(\frac{1}{2}P+p\right)G_0\left(\frac{1}{2}P-p\right) \qquad (28)$$

を計算しなければならない。(28)を書き下すと

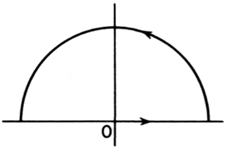
$$\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp_0}{2\pi}\left\{\frac{1}{2}P_0+p_0-\frac{1}{\hbar}\epsilon_{\boldsymbol{P}/2+\boldsymbol{p}}+i\eta\,\mathrm{sgn}\left(\left|\frac{1}{2}\boldsymbol{P}+\boldsymbol{p}\right|-p_\mathrm{F}\right)\right\}^{-1}$$
$$\times\left\{\frac{1}{2}P_0-p_0-\frac{1}{\hbar}\epsilon_{\boldsymbol{P}/2-\boldsymbol{p}}+i\eta\,\mathrm{sgn}\left(\left|\frac{1}{2}\boldsymbol{P}-\boldsymbol{p}\right|-p_\mathrm{F}\right)\right\}^{-1}$$

であるが，この積分の経路を7·8図のような閉曲線に変えると，被積分関数の二つの極のうち一つだけがこの閉曲線内にあるときのみ0でなく，積分の結果は次のようになる。

$$(28)\text{式}=\theta\left(\left|\frac{1}{2}\boldsymbol{P}+\boldsymbol{p}\right|-p_\mathrm{F}\right)\theta\left(\left|\frac{1}{2}\boldsymbol{P}-\boldsymbol{p}\right|-p_\mathrm{F}\right)(\hbar P_0-\epsilon_{\boldsymbol{P}/2+\boldsymbol{p}}-\epsilon_{\boldsymbol{P}/2-\boldsymbol{p}}+i\eta)^{-1}$$
$$-\theta\left(p_\mathrm{F}-\left|\frac{1}{2}\boldsymbol{P}+\boldsymbol{p}\right|\right)\theta\left(p_\mathrm{F}-\left|\frac{1}{2}\boldsymbol{P}-\boldsymbol{p}\right|\right)(\hbar P_0-\epsilon_{\boldsymbol{P}/2+\boldsymbol{p}}-\epsilon_{\boldsymbol{P}/2-\boldsymbol{p}}-i\eta)^{-1}$$

これをもっと簡単な形に表わすため，二つの運動量 $\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'$ に対して次の関数を定義する，

$$N(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')=\begin{cases}1 & (p,p'>p_\mathrm{F})\\ -1 & (p,p'<p_\mathrm{F})\\ 0 & (p>p_\mathrm{F}>p' \text{ または } p'>p_\mathrm{F}>p)\end{cases} \qquad (29)$$



7·8 図

そしてさらに $N\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{P}+\boldsymbol{p},\frac{1}{2}\boldsymbol{P}-\boldsymbol{p}\right)$ を改めて $N(\boldsymbol{P},\boldsymbol{p})$ と書くと

$$(28)\text{式}=N(\boldsymbol{P},\boldsymbol{p})\left\{\hbar P_0-\frac{\hbar^2\boldsymbol{P}^2}{4m}-\frac{\hbar^2\boldsymbol{p}^2}{m}+i\eta N(\boldsymbol{P},\boldsymbol{p})\right\}^{-1} \qquad (30)$$

ただし $\epsilon_{\boldsymbol{p}}=\hbar^2\boldsymbol{p}^2/2m$ を使った。(30)に $N(\boldsymbol{P},\boldsymbol{p})$ が入っていることが多体系の特徴で，Pauli 原理によって生じたものである。真空中の2粒子の散乱の場合はこの N がすべて1におきかわる。

(30)を使うと(25)は

$$\chi(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)=(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')+\frac{N(\boldsymbol{P},\boldsymbol{p})}{\epsilon-\boldsymbol{p}^2+i\eta N(\boldsymbol{P},\boldsymbol{p})}$$
$$\times\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}u(\boldsymbol{k})\chi(\boldsymbol{P}-\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}';P) \qquad (31)$$

となる。ただし

$$\epsilon=\frac{m}{\hbar^2}\left(P_0-\frac{\hbar^2}{4m}\boldsymbol{P}^2\right),\qquad u(\boldsymbol{k})=\frac{m}{\hbar^2}v(\boldsymbol{k}) \tag{32}$$

とおいた。

真空中の散乱との関係　上に注意したように，(31)で $N=1$ としたときの解 χ_0 は，真空中の2粒子の散乱と密接な関係があるので，χ を χ_0 で表わすことを考える。χ_0 の方程式は

$$\chi_0(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)-\frac{1}{\epsilon-\boldsymbol{p}^2+i\eta}\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}u(\boldsymbol{k})\chi_0(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}';P)=(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \tag{33}$$

であるから，(31)の χ は

$$\chi(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)=\chi_0(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)+\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\left\{\frac{N(\boldsymbol{P},\boldsymbol{k})}{\epsilon-\boldsymbol{k}^2+i\eta N(\boldsymbol{P},\boldsymbol{k})}-\frac{1}{\epsilon-\boldsymbol{k}^2+i\eta}\right\}$$
$$\times\int\frac{d^3\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^3}u(\boldsymbol{k}')\chi(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}',\boldsymbol{p}';P) \tag{34}$$

と表わされる。または(26)を使って Γ の方程式にすると

$$\Gamma(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)=\Gamma_0(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)+\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\left\{\frac{N(\boldsymbol{P},\boldsymbol{k})}{\epsilon-\boldsymbol{k}^2+i\eta N(\boldsymbol{P},\boldsymbol{k})}-\frac{1}{\epsilon-\boldsymbol{k}^2+i\eta}\right\}$$
$$\times\frac{m}{\hbar^2}\Gamma(\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}';P) \tag{35}$$

となる。Γ_0 は(26)で χ のかわりに χ_0 を使ったものである。

散乱振幅による表わし方　ここで，χ_0, Γ_0 を真空中の2粒子に対する散乱振幅 $f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})$ を用いて表わしておく。(11)の Fourier 変換をつくれば

$$(k^2-\boldsymbol{p}^2+i\eta)\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{p})-\int\frac{d^3\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^3}u(\boldsymbol{k}')\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k}')=0 \tag{36}$$

となるが，これと(33)を比べ，さらに $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{p})$ が完全系をつくること，つまり

$$\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{p})\,\psi_{\boldsymbol{k}}^*(\boldsymbol{p}')=(2\pi)^3\,\delta(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}') \tag{37}$$

を用いれば，

$$\chi_0(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)=(\epsilon-p'^2+i\eta)\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\,\frac{\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{p})\psi_{\boldsymbol{k}}^*(\boldsymbol{p}')}{\epsilon-k^2+i\eta} \tag{38}$$

となることは容易に確かめられる。

散乱振幅の式(17)は

$$f(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})=-\frac{1}{4\pi}\int\frac{d^3\boldsymbol{q}}{(2\pi)^3}u(\boldsymbol{q})\,\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}) \tag{39}$$

と書けるから，これを(36)に用いると

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{p})=(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{p})-\frac{4\pi f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{k})}{k^2-\boldsymbol{p}^2+i\eta} \tag{40}$$

となる。これの複素共役をとって(38)の $\psi_{\boldsymbol{k}}^*(\boldsymbol{p})$ に代入すると

$$\chi_0(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)=\psi_{\boldsymbol{p}'}(\boldsymbol{p})-\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{p})\left(\frac{1}{\epsilon-\boldsymbol{k}^2+i\eta}+\frac{1}{\boldsymbol{k}^2-\boldsymbol{p}^2+i\eta}\right)4\pi f^*(\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}) \quad (41)$$

が得られる。(41)で $\boldsymbol{p}$ を $\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k}$ と書き，$v(\boldsymbol{k})=(\hbar^2/m)u(\boldsymbol{k})$ を掛けて $\boldsymbol{k}$ で積分すると，左辺は定義により $\Gamma_0(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)$ になる。右辺の $\boldsymbol{k}$ についての積分は(39)によって f で表わされるから，

$$\Gamma_0(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}';P)=-4\pi\frac{\hbar^2}{m}f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}')$$
$$+\frac{4\pi^2\hbar^2}{m}\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}f(\boldsymbol{p},\boldsymbol{k})\left(\frac{1}{\epsilon-\boldsymbol{k}^2+i\eta}+\frac{1}{\boldsymbol{k}^2-\boldsymbol{p}^2+i\eta}\right)f^*(\boldsymbol{p}',\boldsymbol{k}) \quad (42)$$

となり，Γ_0 が f を使って書き表わされた。

最後に粒子のエネルギーの小さいとき，つまり k が十分小さいときは，$f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$ は方向によらず

$$f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\sim-a+ika^2+\mathrm{O}(k^2a^3) \quad (43)$$

という形になることを注意しておく。この a を **scattering length** (散乱長) とよび，剛体球の場合は剛体球の直径になっている。(43)の近似を用いると，(42)の Γ_0 は

$$\Gamma_0(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q};P)=\frac{\hbar^2}{m}\left\{4\pi a+(4\pi a)^2\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\left(\frac{1}{\epsilon-\boldsymbol{k}^2+i\eta}+\frac{P}{\boldsymbol{k}^2-\boldsymbol{q}^2}\right)+\mathrm{O}(a^3)\right\} \quad (44)$$

となる。ただし右辺の最後の項の P は主値積分をとることを表わす。

(44)を(35)に代入すると

$$\frac{m}{\hbar^2}\Gamma(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q};P)=4\pi a+(4\pi a)^2\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}\left[\frac{N(\boldsymbol{P},\boldsymbol{k})}{\epsilon-\boldsymbol{k}^2+i\eta N(\boldsymbol{P},\boldsymbol{k})}-\frac{P}{\boldsymbol{k}^2-\boldsymbol{q}^2}\right]+\mathrm{O}(a^3) \quad (45)$$

となり，Γ が真空中の2粒子の散乱のパラメータを用いて表わされたことになる。さらに(43)の近似のもとでは，$\Gamma_0(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q};P)=\Gamma_0(-\boldsymbol{q},\boldsymbol{q};P)$ であるから，$\Gamma(\boldsymbol{q},\boldsymbol{q};P)=\Gamma(-\boldsymbol{q},\boldsymbol{q};P)$ が成り立つ。したがって自己エネルギー部分 $\Sigma(p)$ は(27)より

$$\hbar\Sigma(p)=-i\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}G_0\left(\frac{1}{2}P-k\right)\Gamma(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k};P) \quad (46)$$

と求められる。

この a による展開は，Fermi 運動量を $\hbar k_{\mathrm{F}}$ とすると，$k_{\mathrm{F}}a\ll1$ のときによい近似になる。実際(45)，(46)を計算していろいろな物理量を求めると $(k_{\mathrm{F}}a)$ のべき展開になる*。$k_{\mathrm{F}}a\ll1$ は k_{F}^3 が粒子数密度に比例することから，粒子間の平均間隔が粒子の大きさに比べて十分大きいこと，つまり低密度であることを意味する。

---

* 詳しい結果については，A. L. Fetter and J. D. Walecka: *Quantum Theory of Many-Particle Theory* (McGraw-Hill, 1971) の4章，11章を参照されたい。

7-3　電子気体（Coulomb 相互作用，リング近似）

金属中の伝導電子に対する一つのモデルとして，互いに Coulomb 相互作用をしている自由粒子という考えがある〔1-5 の a) 参照〕。これのハミルトニアンは(1·60)，または第二量子化の形にして

$$H=\sum_{\boldsymbol{k}}\xi_{\boldsymbol{k}}a^{\dagger}{}_{\boldsymbol{k},\sigma}a_{\boldsymbol{k},\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}V(\boldsymbol{q})\sum_{\substack{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'\\ \sigma,\sigma'}}a^{\dagger}{}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}a^{\dagger}{}_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q},\sigma'}a_{\boldsymbol{k}',\sigma'}a_{\boldsymbol{k},\sigma} \tag{47}$$

$$V(\boldsymbol{q})=\frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \tag{48}$$

で与えられる。相互作用に $\boldsymbol{q}=0$ の項がないのは，電子は一様な正電荷の中にあって，系が全体として電気的に中性であるためである。この系のエネルギーを摂動によって求めようとすると，$V(\boldsymbol{q})$ が(48)のように $q\to 0$ で∞になるため*，特別な注意が必要になる。このことを確かめるために，まず電子の Green 関数の自己エネルギー部分を，相互作用の低次で計算してみる。以下では十分低温で電子が縮退している場合と，高温で電子が縮退していない場合の両方を同時に議論するため，温度 Green 関数について話を進める。したがって(47)のハミルトニアンに $-\mu N$ を入れておき，$\xi_{\boldsymbol{k}}=(\hbar^2\boldsymbol{k}^2/2m)-\mu$ としておく。

上で注意したように，相互作用に $\boldsymbol{q}=0$ の部分がないので，相互作用について1次のグラフのうち，7·1 図の (a) のようなものはない。もっと高次のグラフでも，相互作用の線1本だけで外につながっているようなグラフはない。いいかえると 7·9 図のような部分**は考える必要はない。したがって1次のグラフとしては 7·1 図の (b) のグラフだけを考えればよい。このグラフによる自己エネルギー部分への寄与を $\Sigma^{(1)}$ と書くと，6-4 で述べた Feynmann グラフの規則により



7·9 図

$$\Sigma^{(1)}(\boldsymbol{k},\omega_n)=-\frac{1}{\hbar}\int\frac{d^3\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^3}\,\frac{1}{\beta\hbar}\sum_{\omega_{n'}}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k}',\omega_{n'})e^{i\omega_{n'}\eta}$$

$$=-\frac{1}{\hbar}\int\frac{d^3\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^3}\,V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')n_{\boldsymbol{k}'}{}^0 \tag{49}$$

と書ける。

---

*　これは Coulomb 相互作用が長い距離まで及んでいることの反映である。

**　このようなグラフを**おたまじゃくし** (tadpole) **型グラフ**という。

注意 (49)を導くとき

$$\frac{1}{\beta\hbar}\sum_{\omega_n}\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k},\omega_n)\,e^{i\omega_n\eta}=\frac{1}{\beta\hbar}\sum_{\omega_n}\frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n-\xi_{\boldsymbol{k}}/\hbar} \tag{50}$$

が現われるが，これは次のように計算できる。(50)の和は $\omega_n=(2n+1)\pi k_{\rm B}T/\hbar$ の n についての和であるが，$z=i\omega_n$ に極をもち，その留数が1であるような複素関数 $f(z)$ を考える。そのような複素関数にはいろいろあるが，(50)にある関数 $e^{z\eta}/(z-\xi_{\boldsymbol{k}}/\hbar)$ と掛け合わせたものが，$|z|\to\infty$ で十分速く0になるようなものをとる。そのような関数は

$$f(z)=-\frac{\beta\hbar}{e^{\beta\hbar z}+1} \tag{51}$$

だけであることがわかる。実際 $f(z)\,e^{\eta z}/(z-\xi_{\boldsymbol{k}}/\hbar)$ は，$\mathrm{Re}\,z>0$ で $|z|\to\infty$ では

$$-\frac{\beta\hbar}{z}\exp\{-(\beta\hbar-\eta)\,\mathrm{Re}\,z\}$$

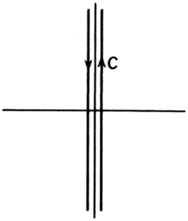
の程度で $(\beta\hbar>\eta)$，十分速く0になる。他方 $\mathrm{Re}\,z<0$ で $|z|\to\infty$ のときは

$$-\frac{\beta\hbar}{z}\exp(\eta\,\mathrm{Re}\,z)$$

の程度で，これも $\eta>0$ の限り十分速く0になる。

そこでまず z 平面上で7·10図のような積分路をとると

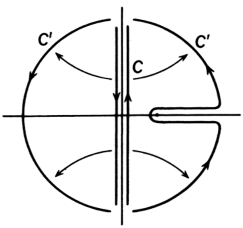
$$\frac{1}{\beta\hbar}\sum_{\omega_n}\frac{e^{i\omega_n\eta}}{i\omega_n-\xi_{\boldsymbol{k}}/\hbar}=\frac{1}{2\pi i}\int_C\frac{1}{e^{\beta\hbar z}+1}\,\frac{e^{\eta z}}{z-\xi_{\boldsymbol{k}}/\hbar}dz \tag{52}$$



7·10 図

になることはCauchyの定理の示すところである。(52)の被積分関数は $|z|\to\infty$ で十分速く0になるので，積分路 C を7·11図のように変形することができる。すると $z=\xi_{\boldsymbol{k}}/\hbar$ のまわりの積分だけが残り，

$$(52)\text{式}=\frac{e^{\eta\xi_{\boldsymbol{k}}}}{e^{\beta\xi_{\boldsymbol{k}}}+1}\xrightarrow[\eta\to0]{}\frac{1}{e^{\beta\xi_{\boldsymbol{k}}}+1}$$



7·11 図

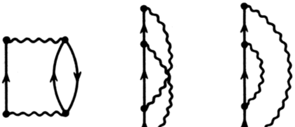
となり，Fermi 分布 $n_{\boldsymbol{k}}{}^0$ を与える。この結果はGreen 関数の定義を考えれば，

$$\frac{1}{\beta\hbar}\sum_{\omega_n}\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k},\omega_n)\,e^{i\omega_n\eta}=-\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k}\tau,\boldsymbol{k},\tau+0)$$
$$=\langle a_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger(\tau)\,a_{\boldsymbol{k}}(\tau)\rangle=n_{\boldsymbol{k}}{}^0$$

となることからむしろ当然である。

2次の自己エネルギー部分の発散

次に自己エネルギーの V について2次の部分を考える。おたまじゃくし型のグラフはないので7·12図の三つの型のグラフだけを考えればよい。それぞれのグラフからの寄与のうち，問題



(a) (b) (c)

7·12 図

になるのは (a) によるもの $\Sigma_2^{(a)}$ である。これを書き下すと

$$\Sigma_2^{(a)}(\boldsymbol{k},\omega_n)=\left(-\frac{1}{\hbar}\right)^2(-2)\iint\frac{d^3\boldsymbol{k}_1}{(2\pi)^3}\frac{d^3\boldsymbol{q}}{(2\pi)^3}\frac{1}{(\beta\hbar)^2}\sum_{\omega_{n'}}\sum_{\omega_{n''}}V(\boldsymbol{q})V(-\boldsymbol{q})$$
$$\times\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\omega_{n'})\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k}_1,\omega_{n''})$$
$$\times\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{q},\omega_n+\omega_{n''}-\omega_{n'}) \tag{53}$$

となるが*，この積分の中で $|\boldsymbol{q}|=0$ 付近の積分は，被積分関数で $V(\boldsymbol{q})$, $V(-\boldsymbol{q})$ を除いたものは $|\boldsymbol{q}|\to0$ で一定値になるから，$\int\frac{d^3\boldsymbol{q}}{q^4}$ という形になり，この積分は発散してしまう。

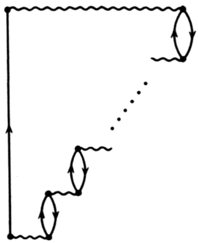
発散の防ぎ方（リング近似）　発散を防ぐために次のように考える。Coulomb 相互作用がふつうの空間で $e^{-\kappa r}/r$ という形に比例しているとすると，その Fourier 変換は $1/(q^2+\kappa^2)$ に比例する。そして $q\ll\kappa$ の領域では $V(\boldsymbol{q})$ は $1/q^2$ ではなく $1/\kappa^2$ という定数になるとする。すると上の積分は $1/\kappa^4$ に，$q<\kappa$ の領域の体積(κ^3 に比例する)を掛けたもの，つまり $1/\kappa$ に比例することになる。本当の相互作用は $\kappa\to0$ にしたものであるから，このままでは $\kappa\to0$ で発散している。そこで高次の項の部分和をとってこの発散を防ごうというわけである。

その基礎的な考えは次のようなものである。相互作用自身は小さいものとし（相互作用定数はこの場合 e^2 であるが，e^2 は十分小さいと考える），e^2 で展開できるものとする。展開の各項を計算するときは，上のように κ を入れておいて有限の値を求める。ところで $\kappa\to0$ にすると，発散する項がいくつも現われるが，同じ次数の項の中では発散の度合いが最も激しいものだけをとる。これを**最高発散項** (most divergent term) **の近似**といい，他の問題にもよく使われる方法である。こうして各次数の最高発散項だけを加え合わせると，その結果は $\kappa\to0$ にしても発散しなくなることが示される。以下では具体的な計算法を簡単に示すことにする。ただし便宜上 κ は初めから入れずに式を書くが，発散する積分は κ を入れて上のように考えるものとする。

7·12 図の (a) と (b), (c) を比べると，(a) が他のグラフと異なるのは，2 本の相互作用のもつ運動量が全く同じになっていることであり，このため $V(\boldsymbol{q})V(-\boldsymbol{q})\propto1/q^4$ という因子が現われたのであった。そこで次数が上が

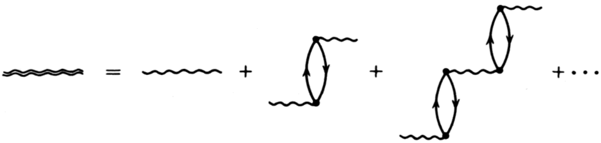
*　(53) の -2 という因子は，閉じた電子線が 1 個あるための -1 と，スピンの和からくる 2 の積である。

ったときの最高発散項は，すべての相互作用における運動量が全く同じものであると考えられる。そのようなグラフは，7·13 図に示すようなものであり，この型のグラフは自由エネルギーの計算では輪になってつながっているので，**リング近似** (ring approximation) とよばれている。



7·13 図

リング近似での自己エネルギー部分は次のようにして求められる。まず**有効**相互作用として7·14図に示すように $U(\boldsymbol{q}, \nu_n)$ を定義する。



7·14 図

式で書けば，

$$U(\boldsymbol{q}, \nu_n) = V(\boldsymbol{q}) + V(\boldsymbol{q})\Pi_0(\boldsymbol{q}, \nu_n)V(\boldsymbol{q}) + \cdots$$
$$= \frac{V(\boldsymbol{q})}{1 - V(\boldsymbol{q})\Pi_0(\boldsymbol{q}, \nu_n)} \tag{54}$$

と書ける。ただし $\Pi_0(\boldsymbol{q}, \nu_n)$ は

$$\Pi_0(\boldsymbol{q}, \nu_n) = \frac{2}{\hbar}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_{\omega_n}\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\mathscr{G}_0(\boldsymbol{p}, \omega_n)\mathscr{G}_0(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}, \omega_n+\nu_n) \tag{55}$$

で定義され，$\nu_n = 2n\pi k_B T/\hbar \ (n=0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$ である。(55) の Π_0 は，系に電場がかかったときにひきおこす電気分極の第一近似にあたっており，**分極部分** (polarization part) といわれている。また (54) は

$$U(\boldsymbol{q}, \nu_n) = V(\boldsymbol{q})/\epsilon(\boldsymbol{k}, \nu_n)$$

と書ける。つまり電子間に働く相互作用が，2電子間の $V(\boldsymbol{q})$ に比べて $1/\epsilon$ 倍になることを示している。外からの電場も同じように減少し，この ϵ が電子系の**誘電率**を与えている。

(55) の Π_0 の式で ω_n についての和は容易に計算できる。

$$\Pi_0(\boldsymbol{q}, \nu_n) = \frac{2}{\hbar}\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_{\omega_n}\frac{1}{i\omega_n - \xi_{\boldsymbol{p}}/\hbar}\frac{1}{i(\omega_n+\nu_n) - \xi_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}/\hbar}$$
$$= \frac{2}{\hbar}\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\frac{1}{i\nu_n - (\xi_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}} - \xi_{\boldsymbol{p}})/\hbar}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_{\omega_n}\Bigg(\frac{1}{i\omega_n - \xi_{\boldsymbol{p}}/\hbar}$$

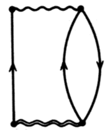
$$-\frac{1}{i(\omega_n+\nu_n)-\xi_{p+q}/\hbar}\Bigg)e^{i\omega_n\eta}$$

$$=\frac{2}{\hbar}\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\frac{n_p{}^0-n_{p+q}{}^0}{i\nu_n-(\xi_{p+q}-\xi_p)/\hbar} \tag{56}$$

ただし第二行目に移るとき，$e^{i\omega_n\eta}$という収束因子をつけて部分分数に分けて書いた。また

$$n_p{}^0=\frac{1}{\exp(\beta\xi_p+1)}\qquad\left(\xi_p=\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m}-\mu\right)$$

は相互作用のない場合の Fermi 分布関数である*。この Π_0 は $q\to0$ で一定値をとるので，(54) の U は $q\to0$ で $-1/\Pi_0$ という一定値をとり，裸の相互作用 $V(\boldsymbol{q})$ のように ∞ になることはなく，これを含む積分も収束するようになる。



7·15 図

このUを用いれば，リング近似での自己エネルギーは 7·15 図で与えられ**，式で書くと

$$\Sigma(\boldsymbol{k},\omega_n)=-\frac{1}{\beta\hbar^2}\sum_{\nu_n}\int\frac{d^3\boldsymbol{q}}{(2\pi)^3}V(\boldsymbol{q})U(\boldsymbol{q},\nu_n)\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\omega_n+\nu_n)$$

$$=-\frac{1}{\beta\hbar^2}\sum_{\nu_n}\int\frac{d^3\boldsymbol{q}}{(2\pi)^3}\frac{V^2(\boldsymbol{q})\,\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n)}{1-V(\boldsymbol{q})\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n)}\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\omega_n+\nu_n) \tag{57}$$

となる。これに現われる積分は発散を含んでいない。

熱力学ポテンシャル　自己エネルギー部分に対して収束する結果が得られたので，これを使って全エネルギーまたは熱力学的ポテンシャルを求める。熱力学ポテンシャル Φ は(6·95)で与えられているが，相互作用についての最低次の近似では，Σ_λ として(57)で V を λV としたものを用い，$\mathscr{G}_\lambda$ としては相互作用のない自由な Green 関数 $\mathscr{G}_0$ でおきかえてしまう。つまり

$$\Phi-\Phi_0=\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\frac{1}{\beta\hbar}\sum_n\int d^3\boldsymbol{k}\,e^{i\omega_n\eta}\hbar\Sigma_\lambda(\boldsymbol{k},\omega_n)\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k},\omega_n)$$

$$=-\frac{\Omega}{(2\pi)^3}\int_0^1\frac{d\lambda}{\lambda}\frac{1}{(\beta\hbar)^2}\sum_{\omega_n}\sum_{\nu_{n'}}\int d^3\boldsymbol{k}\int d^3\boldsymbol{q}\frac{\lambda^2V^2(\boldsymbol{q})\,\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_{n'})}{1-\lambda V(\boldsymbol{q})\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_{n'})}$$

$$\times\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\omega_n+\nu_{n'})\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k},\omega_n) \tag{58}$$

---

*　ただし μ は初めに与えたもので，熱力学ポテンシャルを Φ とすれば，$\partial\Phi/\partial\mu=-N$ からきめるべきであり，μ には相互作用の影響が入っていると考えなければならない。

**　7·15 図の二つの相互作用のうち，一方だけを U にしたのは，両方とも U にすると同じグラフを何回も数えてしまうからである。

ただしスピンについての和として2を掛けた。ここで(55)の Π_0 の定義を使い，λ についての積分を実行すると，(58)は

$$\Phi-\Phi_0=\frac{\Omega}{2(2\pi)^3}\int d^3\boldsymbol{q}\frac{1}{\beta}\sum_{\nu_n}\Big[\log\{1-V(\boldsymbol{q})\,\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n)\}+V(\boldsymbol{q})\,\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n)\Big] \tag{59}$$

と簡単になる。

(59)式の計算法 以下では(59)の計算法を電子気体が縮退している場合と，縮退していない場合について簡単に説明する。

i) 縮退した電子気体の場合 ($T\sim0$ K) (59)の和は $\nu_n=2n\pi/\beta\hbar$ についてであるが，温度が十分低い場合は

$$\sum_{\nu_n}\simeq\frac{\beta\hbar}{2\pi}\int d\nu$$

と積分におきかえることができる。ここで(59)の $\boldsymbol{q}$ の積分を次のように二つに分ける*。

$$\int d^3\boldsymbol{q}=\int_0^\infty 4\pi q^2dq=\left[\int_0^{q_0}+\int_{q_0}^\infty\right]4\pi q^2dq$$

ただし q_0 は Fermi 運動量 k_F に比べると適当に小さいものとする。そして $0\leq q\leq q_0$ の範囲では $\Pi_0(q,\nu)$ は q について最低次の項だけをとれば十分であり，$q_0<q<\infty$ では $V(q)$ について展開できるものとする。すると $0\leq q\leq q_0$ では

$$\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu)\simeq-2\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\frac{\boldsymbol{q}\cdot\nabla_{\boldsymbol{p}}n_{\boldsymbol{p}}{}^0}{i\nu-(\hbar\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q})/m}$$

とおくことができ，0 K では $\nabla_{\boldsymbol{p}}n_{\boldsymbol{p}}{}^0=-(\boldsymbol{p}/p)\delta(p-k_F)$ とおける**ことに注意すれば

$$\Pi_0(q,\nu)=-\frac{mk_F}{\pi^2\hbar^2}R\left(\frac{m\nu}{\hbar k_Fq}\right) \tag{60}$$

$$R(x)=1-x\tan^{-1}\frac{1}{x} \tag{61}$$

と計算できる。(60)からわかるように(59)の積分変数を

$$x=\frac{m\nu}{\hbar k_Fq},\qquad y=\frac{q}{k_F}$$

に変えると便利である。すると(59)は

---

* $\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu)$ も $V(\boldsymbol{q})$ も $|\boldsymbol{q}|=q$ のみの関数であることに注意せよ。

** k_F は $\hbar^2k_F{}^2/2m=\mu$ で定義される。

$$\Phi-\Phi_0$$
$$=\frac{\Omega\hbar^2 k_F{}^5}{8\pi^3 m}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_0^{y_0}y^3dy\left[\log\left\{1+\frac{4m}{\pi\hbar^2 k_F}\left(\frac{e}{y}\right)^2 R(x)\right\}-\frac{4m}{\pi\hbar^2 k_F}\left(\frac{e}{y}\right)^2 R(x)\right]$$
$$-\frac{1}{2}\frac{\Omega\hbar^2 k_F{}^5}{8\pi^3 m}\int_{-\infty}^{\infty}dx\int_{y_0}^{\infty}y^3dy\left\{\frac{4\pi e^2}{k_F{}^2 y^2}\Pi^0\left(k_F y,\frac{\hbar k_F{}^2 xy}{m}\right)\right\}^2 \tag{62}$$

と書ける。これを 0 K で計算してエネルギーへの補正項* E_{corr} を求める。Bohr 半径 $a_0=\hbar^2/me^2$ を用いて

$$E_{\mathrm{corr}}=N\frac{e^2}{2a_0}\epsilon_{\mathrm{corr}} \tag{63}$$

と書き，さらに電子数密度を電子間平均距離 r_0 で次のように表わす。

$$\frac{4\pi}{3}r_0{}^3=\frac{V}{N}$$

そして次元のないパラメータとして

$$r_s=r_0/a_0 \tag{64}$$

を定義すると，r_s は相互作用定数 e^2 に比例している。したがって相互作用についての摂動展開は r_s についてのべき級数を与えることになるが，上で計算した最も発散の強い項の和は，r_s のべき級数ではなく $\log r_s$ に比例する項を含むことが示される。実際の計算結果は

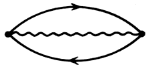
$$\epsilon_{\mathrm{corr}}{}^{(r)}=\frac{2}{\pi^2}(1-\log 2)\log r_s+\mathrm{const.} \tag{65}$$

となる。

V についての摂動計算という立場からいうと，エネルギーはまず V の 0 次である運動エネルギーがあり，これは

$$E_{\mathrm{kin}}=\frac{e^2}{2a_0}N\frac{2.21}{r_s{}^2}$$

である。次の V の 1 次の項は 7·16 図のグラフで表わされるもので，



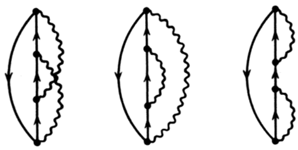
7·16 図

$$E^{(1)}=-\frac{e^2}{2\Omega}\times 2\sum_p\sum_q\frac{4\pi}{q^2}\theta(k_F-|\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}|)\theta(k_F-p)$$

で与えられ，積分の結果は

$$E^{(1)}=N\frac{e^2}{2a_0}\left(-\frac{0.916}{r_s}\right)$$

* Hartree-Fock 近似への補正という意味で**相関エネルギー** (correlation energy) という。



7·17 図

となる。Vについての2次の項でリング近似に入らないものは，7·17 図のグラフで表わされるもので，それぞれが r_s によらない定数を与える。これに対しリング近似の結果は $\log r_s$ に比例し，7·16 図に示したグラフからの寄与よりも重要である。

ここまでの計算は一応できるが，次の項はリング近似のグラフを一部に含むもので，r_s 展開でいうと $r_s \log r_s$ に比例するものがあるはずである。この項の計算は複雑でまだ実行されていない。なおこの展開は $r_s \ll 1$ のとき，つまり電子数密度が十分高いときによい近似になっている。

ii)　電子気体が縮退していない場合　次に温度が十分高くて，電子気体は縮退しておらず，その分布は Boltzmann 分布で与えられる場合を考える。Fermi 分布

$$f(\epsilon)=\frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}+1}$$

が Boltzmann 分布で近似されるのは

$$e^{-\beta\mu}\gg 1 \tag{66}$$

の場合であり，このときはたしかに分布関数は

$$f(\epsilon)\sim e^{\beta\mu}e^{-\beta\epsilon} \tag{67}$$

で近似される。(66)は化学ポテンシャルが負で十分大きいことを意味し，その分布(67)は縮退した Fermi 分布に比べて非常になだらかになっている。

この場合(59)の ν_n についての和を $\nu_n=0$ の部分と $\nu_n\neq 0$ の部分に分けて考える。$\nu_n=2\pi nk_{\mathrm{B}}T/\hbar$ であるから，$n\neq 0$ では $|\nu_n|\gg|\xi_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\xi_{\boldsymbol{p}}|/\hbar$ が成り立つので(56)の $\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n)$ ($n\neq 0$) は次のように変形すると便利である。

$$\begin{aligned}
\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n)
&=2\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\,\frac{n_{\boldsymbol{p}}{}^0(1-n_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}{}^0)-n_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}{}^0(1-n_{\boldsymbol{p}}{}^0)}{i\hbar\nu_n-(\xi_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\xi_{\boldsymbol{p}})/\hbar}\\
&=2\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\,n_{\boldsymbol{p}}{}^0(1-n_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}{}^0)\left\{\frac{1}{i\hbar\nu_n-(\xi_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\xi_{\boldsymbol{p}})/\hbar}-\frac{1}{i\hbar\nu_n+(\xi_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\xi_{\boldsymbol{p}})/\hbar}\right\}\\
&=-4\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\,n_{\boldsymbol{p}}{}^0\,(1-n_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}{}^0)\,\frac{\xi_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\xi_{\boldsymbol{p}}}{(\hbar\nu_n)^2-(\xi_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\xi_{\boldsymbol{p}})^2/\hbar^2}
\end{aligned} \tag{68}$$

したがっていまの場合 $|\nu_n|\gg|\xi_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\xi_{\boldsymbol{p}}|/\hbar$ であるから

$$\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n\neq 0)\simeq -\frac{4}{\hbar^2{\nu_n}^2}\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}n_{\boldsymbol{p}}{}^0(1-n_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}{}^0)\frac{\hbar^2}{m}\left\{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{q})+\frac{1}{2}q^2\right\} \tag{69}$$

と近似でき，Π_0 は $1/(k_{\rm B}T)^2$ に比例することがわかる。しかも(69)は $q\to 0$ では q^2 に比例するので $V(\boldsymbol{q})\Pi_0(\boldsymbol{q},\ \nu_n\neq 0)$ は $q\to 0$ で有限の値になり，V で展開しても発散の心配はない。したがって(59)の $\nu_n\neq 0$ の和は $\{V(\boldsymbol{q})q^2/(k_{\rm B}T)^2\}^2$，つまり $e^4/(k_{\rm B}T)^4$ に比例する。これは前の縮退した場合の 7·16 図に示したグラフと同程度の寄与であり，ここでは無視することにする。

(59)の $\nu_n=0$ の項では事情が全く異なる。実際(56)より

$$\Pi_0(\boldsymbol{q},0)=2\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\frac{n_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}{}^0-n_{\boldsymbol{p}}{}^0}{\xi_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}-\xi_{\boldsymbol{p}}}$$

となり，これは

$$\begin{aligned}\Pi_0(\boldsymbol{q},0)&=4\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}n_{\boldsymbol{p}}{}^0\frac{P}{\xi_{\boldsymbol{p}}-\xi_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{q}}}\\&=\frac{8m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi^2}\int_0^\infty p^2dp\ n_{\boldsymbol{p}}{}^0\int_{-1}^1 dz\frac{1}{2pqz-q^2}\end{aligned}$$

となって容易に計算できる。その結果は

$$\varphi(x)=\frac{1}{\pi x}\int_0^\infty dt\ e^{-t^2/4\pi}t\log\left|\frac{2t+x}{2t-x}\right| \tag{70}$$

という関数を使えば

$$\Pi_0(q,0)=-\frac{2}{k_{\rm B}T}e^{\mu/k_{\rm B}T}\frac{1}{\lambda^3}\varphi(\lambda q) \tag{71}$$

という形になる。ただし λ は

$$\lambda=\left(\frac{2\pi\hbar^2}{mk_{\rm B}T}\right)^{1/2} \tag{72}$$

で定義される長さで，エネルギー $k_{\rm B}T$ をもった電子の波長の長さを表わす。(71)を使えば

$$V(\boldsymbol{q})\Pi_0(\boldsymbol{q},0)\simeq -\frac{8\pi}{k_{\rm B}T}\frac{1}{\lambda^3}e^{\mu/k_{\rm B}T}\frac{e^2}{q^2}\varphi(\lambda q)$$

となるが，これの φ の係数を $-1/s^2$ とおくと(59)より

$\boldsymbol{\Phi}-\boldsymbol{\Phi}_0$

$$\simeq\frac{\Omega}{2\beta}\frac{4\pi}{(2\pi)^3}\left(\frac{8\pi}{k_{\rm B}T}\frac{1}{\lambda^3}e^{\mu/k_{\rm B}T}e^2\right)^{3/2}\int_0^\infty s^2ds\left[\log\left\{1+\frac{1}{s^2}\varphi(\gamma s)\right\}-\frac{1}{s^2}\varphi(\gamma s)\right] \tag{73}$$

$$\gamma=2e\left(\frac{2\pi}{k_BT}e^{\mu/k_BT}\frac{1}{\lambda}\right)^{1/2}$$

となる。ところが $\varphi(x)$ は $0<x<\infty$ で有限であり，(73)の φ の中では $e=0$, つまり $\gamma=0$ とおいても積分は収束する。したがって第一近似として

$$\Phi-\Phi_0\simeq 2\Omega e^3\left(\frac{8}{\pi k_BT}\right)^{1/2}\left(e^{\mu/k_BT}\frac{1}{\lambda^3}\right)^{3/2}\int_0^\infty ds\, s^2\left\{\log\left(1+\frac{1}{s^2}\right)-\frac{1}{s^2}\right\} \tag{74}$$

とすることができ，e^3 に比例する補正が得られる。

相互作用のない Boltzmann 粒子系の熱力学ポテンシャル Φ_0 は

$$\Phi_0=-\frac{2\Omega}{\lambda^3}k_BT\,e^{\mu/k_BT} \tag{75}$$

で与えられること，および(74)の右辺の積分は

$$\int_0^\infty ds\, s^2\left\{\log\left(1+\frac{1}{s^2}\right)-\frac{1}{s^2}\right\}=-\frac{\pi}{3}$$

となることを用いれば，

$$\Phi=-\frac{2\Omega}{\lambda^3}k_BT\,e^{\mu/k_BT}\left\{1+\frac{\sqrt{\pi}}{3}\left(\frac{2e^2/\lambda}{k_BT}\right)^{3/2}e^{\mu/2k_BT}\right\} \tag{76}$$

と計算できる。(76)の意味を考えるために，まず粒子数 N を

$$N=-\frac{\partial\Phi}{\partial\mu}=\frac{2\Omega}{\lambda^3}e^{\mu/k_BT}\left\{1+\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left(\frac{2e^2/\lambda}{k_BT}\right)^{3/2}e^{\mu/2k_BT}\right\} \tag{77}$$

と計算し，これから e^{μ/k_BT} を

$$e^{\mu/k_BT}\approx\frac{\lambda^3}{2}n\left\{1-\sqrt{\pi}\left(\frac{e^2 n^{1/3}}{k_BT}\right)^{3/2}\right\} \tag{78}$$

と電子数密度 $n=N/\Omega$ で表わしておく。

ところで熱力学ポテンシャル Φ は $-p\Omega/k_BT$ に等しいので，系の圧力は

$$p=-\frac{\Phi}{\Omega}k_BT\simeq nk_BT\left\{1-\frac{\sqrt{\pi}}{3}\left(\frac{e^2 n^{1/3}}{k_BT}\right)^{3/2}\right\} \tag{79}$$

となる。これが状態方程式で，$e=0$ のときは理想気体の式に一致している。この式は e^2 についての摂動計算であるにもかかわらず，$(e^2)^{3/2}$ に比例する結果を得たことは，縮退している場合 $\log e^2$ に比例する項を得たことと対比されることで，ともに注目すべきことである。

(79)式の物理的な意味　(76)または(79)と同等な式は，電解質溶液中のイオンの熱力学ポテンシャルに対して Debye と Hückel によって1923年に求められている*。電解質溶液には正，負のイオンがあって，全体とし

* P. Debye and E. Hückel: Physik. Z. **24**, 185, (1923).

て中性を保っているが，正イオンの近くには負イオンが，負イオンの近くには正イオンがより多く存在するはずである。どれだけ多く存在するかは各点の電位によってきまり，逆に電位は各イオンの濃度によってきまる。Debye と Hückel はこれをうまく解いて，各イオンのつくる電位を求め，それから系の自由エネルギーを計算した。以下ではその理論の要点を，いまの問題，つまり一様な正電荷の海の中にある電子について説明しておこう。

いま原点に電荷 e_0 の粒子が1個存在しているとして，そのまわりにある電子数密度を $n(\boldsymbol{r})$，電位を $\varphi(\boldsymbol{r})$ とする。平均の電子数密度を n_0 とすると，電位に対する Poisson の式は

$$\nabla^2\varphi=4\pi[-e\{n(\boldsymbol{r})-n_0\}+e_0\delta(\boldsymbol{r})] \tag{80}$$

と書ける。一方電子は Boltzmann 分布をしているとすると，$n(\boldsymbol{r})$ は位置エネルギー $+e\varphi(\boldsymbol{r})$ を使って

$$n(\boldsymbol{r})=n_0e^{-e\varphi(\boldsymbol{r})/k_BT} \tag{81}$$

と表わされる。点 $\boldsymbol{r}$ が原点に余り近くなければ

$$e\varphi\ll k_BT$$

が成り立つから，(81)を展開して

$$n(\boldsymbol{r})-n_0=-n_0\,e\varphi(\boldsymbol{r})/k_BT \tag{82}$$

と近似できる。(82)を(80)に代入すると

$$\left(\nabla^2-\frac{4\pi n_0e^2}{k_BT}\right)\varphi(\boldsymbol{r})=+4\pi e_0\delta(\boldsymbol{x}) \tag{83}$$

となる。この式の解は

$$\varphi(\boldsymbol{r})=+e_0\frac{e^{-\kappa_D r}}{r} \tag{84}$$

$$\kappa_D=\left(\frac{4\pi n_0e^2}{k_BT}\right)^{1/2} \tag{85}$$

であり，$r>\kappa_D{}^{-1}$ では $\varphi(\boldsymbol{r})\sim 0$ になる。

この結果の物理的な意味は次の通りである。原点に電荷があるとその近くの電子が移動して，空間電荷をつくり，原点の電荷の影響を小さくしようとする。そのため遠くから見ると全体はほぼ電気的に中性になり，(84)のように電位は $r>\kappa_D{}^{-1}$ ではほとんど0になってしまう。これを **Coulomb 力の遮蔽** (screening) といい，$\kappa_D{}^{-1}$ を **Debye の遮蔽距離**とよんでいる。

この場合の電子間の相互作用エネルギーを計算する。そのためにはまず(84)の $\varphi(\boldsymbol{r})$ は原点の電荷 e_0 による電位と，周囲に誘起された空間電荷

によるものとの和であることに注意する。つまり空間電荷のつくる電位 $\varphi'(\boldsymbol{r})$ は

$$\varphi'(\boldsymbol{r})=\varphi(\boldsymbol{r})-\frac{e_0}{r}$$

で与えられ，これの原点での値は

$$\varphi'(0)=-e_0\kappa_D \tag{86}$$

で与えられる。したがってこの原点の電荷と周囲の電荷との相互作用エネルギーは

$$W_{\text{int}}=-e_0{}^2\kappa_D$$

で与えられる。原点の粒子も電子とすると，W_{int} は一つの電子と他の電子との間の相互作用エネルギーであるから，すべての電子の間に働く相互作用のエネルギーは

$$W_{\text{int}}=-\frac{N}{2}e^2\kappa_D \tag{87}$$

となる。ただし電子の総数Nを掛け，二つの粒子の間の相互作用は二重に数えているので半分にした。(87)は熱力学的にいえば内部エネルギーなので，Helmholtz の自由エネルギーの相互作用による部分は，熱力学の式

$$\frac{\partial}{\partial T}\left(\frac{F}{T}\right)=-\frac{E}{T^2}$$

を使って

$$F_{\text{int}}=-T\int\frac{W_{\text{int}}}{T^2}dT$$

と求めることができる。(87)の W_{int} には，温度 T は κ_D を通じてのみ入っており，κ_D は(85)からわかるように $T^{-1/2}$ に比例するので，

$$F_{\text{int}}=\frac{2}{3}W_{\text{int}}=-\frac{1}{3}N\,e^2\kappa_D \tag{88}$$

となる。

相互作用による圧力は

$$p_{\text{int}}=-\partial F_{\text{int}}/\partial\Omega$$

から求められ，$\kappa_D\propto n_0{}^{1/2}=(N/\Omega)^{1/2}$ であることから

$$p_{\text{int}}=F_{\text{int}}/2\Omega$$

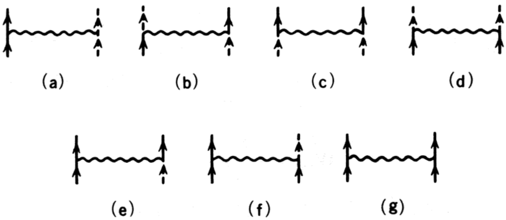
すなわち

$$\frac{p_{\text{int}}\Omega}{Nk_BT}=-\frac{1}{6}\frac{e^2\kappa_D}{kT}=-\frac{\sqrt{\pi}}{3}\left(\frac{e^2n_0{}^{1/3}}{k_BT}\right)^{3/2}$$

となり，これは(79)の第二項と完全に一致する。

7-4　相互作用のある Bose 粒子系

Bose 凝縮をしている Bose 粒子系の相互作用の取り扱いについては，5-9 で述べたように，運動量 $\boldsymbol{p}=0$ の粒子の演算子は c 数におきかえ，$\boldsymbol{p}\neq 0$ の粒子に対してのみ Feynmann グラフを考えればよい。その結果粒子間の相互作用は(5·104 a～g)の七つの型に分けることができる。それを Feynmann グラフで示せば 7·18 図のようになる。

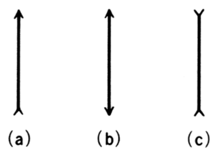


7·18 図

Green 関数として

$$G_{11}(x, y)=(0|\mathrm{T}\,[\phi_1(x)\phi_1^\dagger(y)]|0) \tag{89}$$

を考える。これを 7·19 図 (a) のように太い実線で示すことにすると，7·18 図(c), (d) のような相互作用のために，7·19 図(b), (c)のような Green 関数になることがある。これに相当する Green 関数はそれぞれ

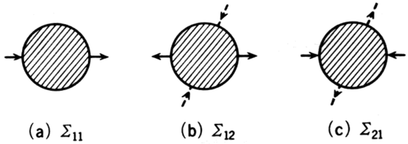


7·19 図

$$G_{12}(x, y)=(0|\mathrm{T}\,[\phi_1^\dagger(x)\phi_1^\dagger(y)]|0) \tag{90 a}$$

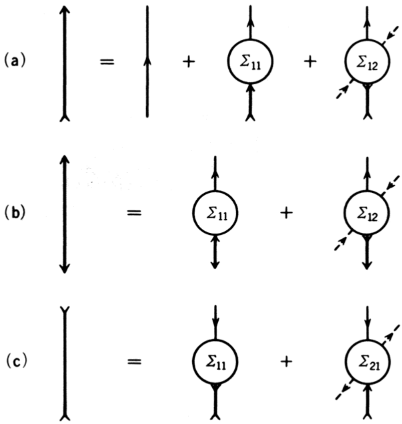
$$G_{21}(x, y)=(0|\mathrm{T}\,[\phi_1(x)\phi_1(y)]|0) \tag{90 b}$$

のように定義される。(90 a, b) のような Green 関数が現われることに対応して，自己エネルギーも通常のものだけでなく，7·20 図のように三つの型が現われる。これらの自己エネルギー部分を使うと，



7·20 図

それぞれの Green 関数は 7·21 図のように表わすことができる。図の細



7·21 図

い実線は相互作用のない自由粒子の Green 関数である。

7·21図を運動量表示で表わすと

$$G_{11}(p)=G^{(0)}(p)+G^{(0)}(p)\Sigma_{11}(p)G_{11}(p)+G^{(0)}(p)\Sigma_{12}(p)G_{21}(p) \quad (91\,\mathrm{a})$$

$$G_{12}(p)=G^{(0)}(p)\Sigma_{11}(p)G_{12}(p)+G^{(0)}(p)\Sigma_{12}(p)G_{11}(-p) \quad (91\,\mathrm{b})$$

$$G_{21}(p)=G^{(0)}(-p)\Sigma_{11}(-p)G_{21}(p)+G^{(0)}(-p)\Sigma_{21}(p)G_{11}(p) \quad (91\,\mathrm{c})$$

となる。(91 a～c) はこのままでも解けるが，もっと見やすい形にするため次のようにする。新しい Green 関数として

$$G_{22}(x, y)=(0|\mathrm{T}\,[\phi^{\dagger}(x)\phi(y)]|0) \quad (92)$$

を導入し(7·22 図)，G_{ij} をまとめて 2 行 2 列の行列で表わす。

$$\hat{G}(x, y)=\begin{pmatrix} G_{11}(x, y) & G_{12}(x, y) \\ G_{21}(x, y) & G_{22}(x, y) \end{pmatrix} \quad (93)$$



7·22 図

これの Fourier 変換を

$$\hat{G}(p)=\begin{pmatrix} G_{11}(p) & G_{12}(p) \\ G_{21}(p) & G_{22}(p) \end{pmatrix}$$

と書くと

$$G_{22}(p)=G_{11}(-p)$$

であることはすぐにわかる。同様に自己エネルギー，自由粒子の Green 関数も行列形式で次のように書く。

$$\hat{\Sigma}(p)=\begin{pmatrix}\Sigma_{11}(p) & \Sigma_{12}(p)\\ \Sigma_{21}(p) & \Sigma_{22}(p)\end{pmatrix},\qquad \Sigma_{22}(p)=\Sigma_{11}(-p) \tag{94}$$

$$\hat{G}^{(0)}(p)=\begin{pmatrix}G^{(0)}(p) & 0\\ 0 & G^{(0)}(-p)\end{pmatrix} \tag{95}$$

この行列形式を使えば，(91)はまとめて

$$\hat{G}(p)=\hat{G}^{(0)}(p)+\hat{G}^{(0)}(p)\hat{\Sigma}(p)\hat{G}(p) \tag{96}$$

と書け，これの解は

$$\begin{aligned}\hat{G}(p)&=\{1-\hat{G}^{(0)}(p)\hat{\Sigma}(p)\}^{-1}\hat{G}^{(0)}(p)\\ &=\{\hat{G}^{(0)-1}(p)-\hat{\Sigma}(p)\}^{-1}\end{aligned} \tag{97}$$

となる。

解(97)の具体的な形　ここで自由粒子の Green 関数は ($p=\omega, \boldsymbol{p}$)，化学ポテンシャルを μ とすれば，(6·78′)と同様に

$$G^{(0)}(p)=\frac{1}{(\omega-\omega_{\boldsymbol{p}}+\mu/\hbar+i\eta)},\qquad \omega_{\boldsymbol{p}}=\frac{\hbar}{2m}p^2 \tag{98}$$

で与えられているので*，(97)はすぐに計算できる。その結果は

$$G_{11}(p)=\frac{1}{D(p)}\{\omega-\omega_{\boldsymbol{p}}+\mu/\hbar+A(p)-B(p)\} \tag{99 a}$$

$$G_{12}(p)=-\frac{1}{D(p)}\Sigma_{12}(p) \tag{99 b}$$

$$G_{21}(p)=-\frac{1}{D(p)}\Sigma_{21}(p) \tag{99 c}$$

$$D(p)=\{\omega-B(p)\}^2-\{\omega_{\boldsymbol{p}}-\mu/\hbar+A(p)\}^2+\Sigma_{12}(p)\Sigma_{21}(p) \tag{100}$$

$$A(p)=\frac{1}{2}\{\Sigma_{11}(p)+\Sigma_{11}(-p)\},\quad B(p)=\frac{1}{2}\{\Sigma_{11}(p)-\Sigma_{11}(-p)\} \tag{101}$$

となる。

以上は一般的な議論であるが，以下では相互作用の最低次で自己エネルギーを計算してみる。相互作用の1次では，Σ_{11} に相当するのは 7·17 図の (a), (b) で，Σ_{12} には (c)，Σ_{21} には (d) が対応している。つまり

$$\hbar\Sigma_{11}(p)\sim n_0\{v(0)+v(\boldsymbol{p})\} \tag{102}$$

$$\hbar\Sigma_{12}(p)=\hbar\Sigma_{21}(p)\sim n_0 v(\boldsymbol{p}) \tag{103}$$

である。

化学ポテンシャル μ の計算　ここで相互作用のあるときの化学ポテンシ

---

* Green 関数の定義が 6 章の場合と $-i$ だけ違っていることに注意。また Heisenberg 表示は $H-\mu N$ で定義されているので $\mu/\hbar$ がつく。

ャル μ をきめねばならない。まず 0 K での熱力学ポテンシャルは，基底状態を $|0\rangle$ とすると，

$$\Omega(T=0, \Omega, \mu, n_0)=\langle 0|H-\mu N|0\rangle$$

で与えられる。ここで(5·101)の条件を使うと

$$0=\left(\frac{\partial \Omega}{\partial n_0}\right)_\mu=\left\langle 0\left|\frac{\partial H}{\partial n_0}-\mu\frac{\partial N}{\partial n_0}\right|0\right\rangle \tag{104}$$

となるが，$H=H_0+V$ とすると運動エネルギー H_0 は n_0 によらないから

$$\frac{\partial H}{\partial n_0}=\frac{\partial V}{\partial n_0}, \quad \frac{\partial N}{\partial n_0}=\Omega$$

であることを用いると

$$\mu=\frac{1}{\Omega}\left\langle 0\left|\frac{\partial V}{\partial n_0}\right|0\right\rangle \tag{105}$$

となる。この μ を相互作用の 1 次までの近似で求めるには，$\partial H_1/\partial n_0$ が 1 次であるから，$|0\rangle$ としては相互作用のないときの基底状態を使ってよい。すると(5·102)で H_1 の行列要素はすべて 0 になり，残るのは相互作用の中の定数項，つまり(5·103)の最後の項の微分だけである。したがって

$$\mu=n_0 v(0) \tag{106}$$

となる。

(106)と(102), (103)を比べると，

$$\mu=\hbar\{\Sigma_{11}(p)-\Sigma_{12}(p)\} \tag{107}$$

という関係が成り立っていることがわかる。これは摂動の 1 次の項だけで確かめたのであるが，実はもっと一般的にすべての次数で成り立つものであることが，Hugenholtz と Pines* によって示されている。

最低次における Green 関数 (102), (103), (106)を(100)に代入すると

$$D(p)=\omega^2-\{\omega_{\boldsymbol{p}}+n_0 v(\boldsymbol{p})/\hbar\}^2+\{n_0 v(\boldsymbol{p})/\hbar\}^2$$

となるので，

$$E_{\boldsymbol{p}}=[\{\hbar\omega_{\boldsymbol{p}}+n_0 v(\boldsymbol{p})\}^2-\{n_0 v(\boldsymbol{p})\}^2]^{1/2} \tag{108}$$

とおくと，Green 関数は

$$G_{11}(p)=\frac{1}{\omega^2-(E_{\boldsymbol{p}}/\hbar)^2}\left[\omega-\frac{1}{\hbar}\{\omega_{\boldsymbol{p}}+n_0 v(\boldsymbol{p})\}\right] \tag{109}$$

$$G_{12}(p)=G_{21}(p)=\frac{-n_0 v(\boldsymbol{p})/\hbar}{\omega^2-(E_{\boldsymbol{p}}/\hbar)^2} \tag{110}$$

となる。

---

* N. Hugenholtz and D. Pines: Phys. Rev. **116**, 489 (1959).

この結果は実は **4–6** で述べた Bogoljubov の結果に一致している。まず(108)の E_p は(4·82)と一致していることはすぐにわかるし，また(109)，(110)を部分分数に分けると，(4·81)の u_p, v_p を使って

$$G_{11}(p)=\frac{u_p{}^2}{\omega-E_p/\hbar+i\eta}-\frac{v_p{}^2}{\omega+E_p/\hbar-i\eta} \tag{111}$$

$$G_{12}(p)=G_{21}(p)=-u_pv_p\left(\frac{1}{\omega-E_p/\hbar+i\eta}-\frac{1}{\omega+E_p/\hbar-i\eta}\right) \tag{112}$$

となることはすぐにわかる。これは G_{11}, G_{12} の定義を(4·73)を使って $a_p{}^\dagger$, a_p で書き直し，$|0\rangle$ として a_p の真空を用いて計算した結果と一致している。

演習問題 7.

1. Green 関数(1)式が(6)式を満たすことを示せ。

2. Hartree-Fock 近似での自己エネルギー部分(7·1 図)を自由粒子の Green 関数と相互作用で表わしたとき，2 次から 3 次までの項を Feynmann グラフで示せ。

3. (13) 式の $G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ の Fourier 変換を $G(\boldsymbol{q})$ として，$G(\boldsymbol{q})$ に対する方程式を求めよ。そしてその解は

$$G_\pm(\boldsymbol{q})=\frac{-1}{q^2-k^2\pm i\eta}$$

と書け，これを逆変換すると $G_-(\boldsymbol{q})$ から(15)式が得られることを示せ。また $G_+(\boldsymbol{q})$ の逆変換はどういう形になるかを調べよ。

4. (21)式で定義される Q は，(22)式を満たすことを示せ。

5. (36), (37)式を用い，(38)式の χ_0 が(33)式を満たすことを示せ。

6. Boltzmann 統計に従う自由粒子の熱力学ポテンシャルは，(75)式で与えられることを示せ。

7. Bose 粒子系で，$a_k{}^\dagger$, a_p に Bogoljubov 変換(4·73)を施して G_{11}, G_{12}, G_{21} を計算し，(111), (112)式が得られることを示せ。

8. Green 関数に対する別の近似

8-1 Green 関数の運動方程式

Green 関数を近似的に求めるのに，その運動方程式を近似的に解く方法がある。6 章でも述べたように，Green 関数は次の方程式を満たしている。

$$i\frac{\partial}{\partial t}G(x, x')=\delta^{(4)}(x-x')+\frac{i}{\hbar}\langle \mathrm{T}[[H,\ \psi(x)]\psi^\dagger(x')]\rangle \qquad (1\,\mathrm{a})$$

$$-\frac{\partial}{\partial \tau}\mathscr{G}(x, x')=\delta^{(4)}(x-x')-\langle \mathrm{T}_\tau\,[[K,\ \psi(x)]\psi^\dagger(x')]\rangle \qquad (1\,\mathrm{b})$$

ただし(1 a) は 0 K での Green 関数に対する方程式，(1 b) は有限温度の Green 関数に対するもので，$K=H-\mu N$ である。一般に相互作用をしている粒子系で，ハミルトニアンが

$$H=\int\psi^\dagger(\boldsymbol{r})h(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}+\frac{1}{2}\iint\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}d^3\boldsymbol{r}'$$

という形をしているときは，(1 a), (1 b) はそれぞれ

$$\left\{i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{\hbar}h(\boldsymbol{r})\right\}G(x, x')=\delta^{(4)}(x-x')-\frac{i}{\hbar}\int d^3\boldsymbol{r}_1 v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)$$
$$\times\langle \mathrm{T}\,[\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1, t)\psi(\boldsymbol{r}_1, t)\psi(x)\psi^\dagger(x')]\rangle \qquad (2\,\mathrm{a})$$

$$\left[-\frac{\partial}{\partial \tau}-\{h(\boldsymbol{r})-\mu\}\right]\mathscr{G}(x, x')=\delta^{(4)}(x-x')-\int d^3\boldsymbol{r}_1 v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)$$
$$\times\langle \mathrm{T}_\tau\,[\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1, \tau)\psi(\boldsymbol{r}_1, \tau)\psi(x)\psi^\dagger(x')]\rangle \qquad (2\,\mathrm{b})$$

となる。相互作用がないときは，(2 a, b) の右辺の第二項はなくなり，G または $\mathscr{G}$ はすぐに求められる。しかし相互作用があるときは，この右辺第二項は 2 体の Green 関数を含んでいるので，これがわからないかぎり，

1体の Green 関数は求められない。2体の Green 関数を求めるためにそれの運動方程式をつくると，相互作用のために3体の Green 関数が現われ，3体の Green 関数の方程式をつくると4体が現われる。こうして方程式はどこまでも続いて閉じないため，正確に解くことはできない。そこで高次の Green 関数を何らかの形で低次の Green 関数によって近似的に表わし*，閉じた形の方程式をつくり，それを解いて Green 関数を求めることが行なわれている。この近似の短所はその物理的意味がはっきりしない点にある。7章に述べたグラフの一部を加え合わせる方法は，ある原理に基づいて加え合わせるべきグラフの型をきめることができたが，ここの運動方程式の方法ではそのような指導原理を見出すことが困難である。そして近似の意味を理解するには，意味がはっきりしている他の近似と比較しなければならない。

以上のような短所があるにせよ，この近似はうまく行なうと他の近似では得られないようなよい結果が得られることもあり，また多くの場合数学的に簡単なのでよく使われることがある。以下ではうまくいった場合の例を二，三述べることにする。

8-2 Hartree-Fock 近似

運動方程式(2 a, b)に対する一番簡単な近似は，右辺の2体の Green 関数を次のように1体の Green 関数の積で近似することである。たとえば(2 a)で

$$\begin{aligned}&\langle \mathrm{T}[\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1,t)\psi(\boldsymbol{r}_1,t)\psi(x)\psi^\dagger(x')]\rangle\\&\qquad\longrightarrow\langle\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1,t)\psi(\boldsymbol{r}_1,t)\rangle\langle \mathrm{T}[\psi(x)\psi^\dagger(x')]\rangle\\&\qquad\quad\pm\langle\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1,t)\psi(\boldsymbol{r},t)\rangle\langle \mathrm{T}[\psi(\boldsymbol{r}_1,t)\psi^\dagger(x')]\rangle\end{aligned}\tag{3}$$

と近似する。ただし $x=(\boldsymbol{r},t)$ を使った。元来，2体の Green 関数は，2粒子間の相関を含んでいるのに対し，1体の平均値の積の形は2粒子が独立に運動していることを意味する。したがってこの近似は2粒子間の相関を無視することになり，前に述べた Hartree-Fock 近似になっているものと期待される。実際，この近似が Hartree-Fock 近似と同等であることが次のようにして示される。ただし議論は簡単のため Fermi 粒子系に限るものとする。

---

*　これを Green 関数の**切断** (decoupling) とよんでいる。

(3)を(2 a)に代入し

$$\langle\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1, t)\psi(\boldsymbol{r}_1, t)\rangle = n(\boldsymbol{r}_1)$$

は点 $\boldsymbol{r}_1$ における粒子数密度を表わすことを用いれば

$$\left\{i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{\hbar}h(\boldsymbol{r})-\frac{1}{\hbar}\int d^3\boldsymbol{r}_1 v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)n(\boldsymbol{r}_1)\right\}G(x, x')$$

$$+\frac{1}{\hbar}\int d^3\boldsymbol{r}_1 v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\langle\psi^\dagger(\boldsymbol{r}_1)\psi(\boldsymbol{r})\rangle G(\boldsymbol{r}_1 t, x') = \delta^{(4)}(x-x')$$

と書ける。これを

$$i\frac{\partial}{\partial t}G(x, x')-\frac{1}{\hbar}\int d^3\boldsymbol{r}_1\, h_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1)G(\boldsymbol{r}_1 t, x') = \delta^{(4)}(x-x') \qquad (4)$$

という形に書くと，$h_{\mathrm{eff}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1)$ は前章の(7・7)と全く同じ式になる。つまり(4)は Hartree-Fock 近似での Green 関数を与える式である。

以上は(2 a)について述べたが，温度 Green 関数に対しても同じことが成り立つ。証明は読者に任せることにする。

8-3 超伝導に対する Gor'kov の方法

4-4 で述べたように，超伝導の BCS 理論は Hartree-Fock 近似を一般化したものといえる。したがって前節での方法を拡張すれば同じ結果を得ることができるはずである。これを実際に示したのが Gor'kov で*，これは単に BCS 理論を再現しただけでなく，超伝導の現象論として最もすぐれている Ginzburg(ギンズブルグ)-Landau(ランダウ)方程式（略して G-L 方程式という）を導出することに成功し，さらにもっと細かい問題，たとえば不純物の影響などを詳しく調べることができるようになり，超伝導物理学に飛躍的な進歩をもたらした理論である。この節では BCS 理論と同じ結果が得られることを示し，次節に G-L 方程式の導出について説明する。

まず超伝導のモデルとして次のハミルトニアンをとる。

$$K = H-\mu N = \sum_\sigma\int\psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{r})\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2-\mu\right)\psi_\sigma(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}$$

$$-\frac{1}{2}g\sum_\sigma\sum_{\sigma'}\int\psi_\sigma^\dagger(\boldsymbol{r})\psi_{\sigma'}^\dagger(\boldsymbol{r})\psi_{\sigma'}(\boldsymbol{r})\psi_\sigma(\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r} \qquad (5)$$

ただし後で必要になるので，以下ではスピン自由度 σ, σ' をちゃんと書いておくことにする。温度 Green 関数を

* L. P. Gor'kov : Sov. Phys. JETP, **7**, 505 (1958).

$$\mathscr{G}(x-x')=-\langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\uparrow(x)\psi_\uparrow^\dagger(x')]\rangle \tag{6}$$

と書き，これの運動方程式をつくると

$$\left\{-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}+\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}+\mu\right)\right\}\mathscr{G}(x-x')$$

$$-g\sum_\sigma\langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\downarrow^\dagger(x)\psi_\downarrow(x)\psi_\uparrow(x)\psi_\uparrow^\dagger(x)]\rangle$$

$$=\hbar\delta^{(4)}(x-x') \tag{7}$$

となる。ここで左辺の最後の項の 2 体の Green 関数を 1 体の積に分ける。

$$\langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\downarrow^\dagger(x)\psi_\downarrow(x)\psi_\uparrow(x)\psi_\uparrow^\dagger(x')]\rangle$$

$$\longrightarrow \langle\psi_\downarrow^\dagger(x)\psi_\downarrow(x)\rangle\langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\uparrow(x)\psi_\uparrow^\dagger(x')]\rangle$$

$$-\langle\psi_\downarrow(x)\psi_\uparrow(x)\rangle\langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\downarrow^\dagger(x)\psi_\uparrow^\dagger(x')]\rangle \tag{8}$$

ふつうの Hartree-Fock 近似では(8)の第一項のみであるが，超伝導の場合，Cooper 対の存在に対応して第二項のような積も現われると考えるのである。

切断(8)式の意味　(8) の第二項が Cooper 対の存在に対応していることは，次のように考えればよいであろう。Cooper 対は 2 個の電子がつくる束縛状態なので，電子数が N のときの基底状態を $|N,0\rangle$ と書くと，一般に

$$\psi_\uparrow^\dagger(\boldsymbol{r})\psi_\downarrow^\dagger(\boldsymbol{r})|N,0\rangle=\sum_s C_s|N+2,s\rangle$$

になるが，右辺の和のうち基底状態 $s=0$ は $|N,0\rangle$ に Cooper 対を 1 個つけ加えた状態になっている。この状態の係数 C_0 は励起状態の係数 $C_s\,(s\neq 0)$ に比べるとずっと大きい。これは Bose 凝縮した Bose 粒子系で，運動量空間で $a_0^\dagger|N,0\rangle$ は $a_{p\neq0}^\dagger|N,0\rangle$ に比べてずっと大きいことと同じである。したがって

$$\langle N+2,0|\psi_\uparrow^\dagger\psi_\downarrow^\dagger|N,0\rangle \tag{9}$$

は 1 の程度の量になり，(8)の最後の項の平均値は(9)のような意味にとっておけばよいことになる。

Green 関数の方程式と解　さて(8)の右辺第一項は，前にも述べたように化学ポテンシャル μ への小さな補正を与えるだけなので無視することにし，

$$\Delta=g\langle\psi_\downarrow(\boldsymbol{r})\psi_\uparrow(\boldsymbol{r})\rangle \tag{10}$$

$$\mathscr{F}^\dagger(x-x')=\langle \mathrm{T}_\tau[\psi_\uparrow^\dagger(x)\psi_\downarrow^\dagger(x')]\rangle \tag{11}$$

と書くと，(7)は

$$\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}+\mu\right)\mathscr{G}(x-x')+\Delta\mathscr{F}^\dagger(x-x')=\hbar\delta^{(4)}(x-x') \tag{12}$$

となる。同じ近似で $\mathscr{F}^\dagger$ の方程式をつくると

$$\left(-\hbar\frac{\partial}{\partial\tau}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{r}^2}-\mu\right)\mathscr{F}^\dagger(x-x')+\Delta^*\mathscr{G}(x-x')=0 \qquad (13)$$

となることが容易に確かめられる。こうして(12)と(13)を $\mathscr{G}$ と $\mathscr{F}^\dagger$ について解くことができ，求められた $\mathscr{F}^\dagger$ を用いて Δ^* が計算でき，すべての量が求められることになる。

(12), (13)を解くには，$\mathscr{G}(x-x')$, $\mathscr{F}^\dagger(x-x')$ の Fourier 変換を用いると便利である。それぞれの Fourier 変換を $\mathscr{G}_{\omega_n}(\boldsymbol{k})$, $\mathscr{F}_{\omega_n}(\boldsymbol{k})$ と書くと

$$\left.\begin{aligned}&\left(i\omega_n-\frac{1}{\hbar}\xi_k\right)\mathscr{G}_{\omega_n}(\boldsymbol{k})+\frac{1}{\hbar}\Delta\mathscr{F}_{\omega_n}{}^\dagger(\boldsymbol{k})=1\\&\left(i\omega_n+\frac{1}{\hbar}\xi_k\right)\mathscr{F}_{\omega_n}{}^\dagger(\boldsymbol{k})+\frac{1}{\hbar}\Delta^*\mathscr{G}_{\omega_n}(\boldsymbol{k})=0\end{aligned}\right\} \qquad (14)$$

$$\xi_k=\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m}-\mu$$

が得られる。(14)は容易に解けて，その結果は

$$\mathscr{G}_{\omega_n}(\boldsymbol{k})=-\frac{i\omega_n+\xi_k/\hbar}{\omega_n{}^2+(\xi_k{}^2+|\Delta|^2)/\hbar^2} \qquad (15)$$

$$\mathscr{F}_{\omega_n}{}^\dagger(\boldsymbol{k})=\frac{\Delta^*/\hbar}{\omega_n{}^2+(\xi_k{}^2+|\Delta|^2)/\hbar^2} \qquad (16)$$

となる。

ギャップ方程式と解　ところで Δ は (10) で与えられ，これは ψ の Fourier 変換

$$\psi(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_k e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}a_k$$

を用いれば

$$\Delta=\frac{g}{\Omega}\sum_k\langle a_{-k\downarrow}a_{k\uparrow}\rangle \qquad (17)$$

と書けるので，$\mathscr{F}$ を使って表わせば

$$\Delta=\frac{g}{\Omega}\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar}\sum_{\omega_n}\sum_k\mathscr{F}_{\omega_n}(\boldsymbol{k})e^{i\omega_n 0+} \qquad (18)$$

となる。(16)の複素共役を用いて(18)を表わすと，Δ をきめる方程式として

$$\Delta=\frac{g}{\Omega}\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar}\sum_{\omega_n}\sum_k\frac{\Delta/\hbar}{\omega_n{}^2+(\xi_k{}^2+|\Delta|^2)/\hbar^2} \qquad (19)$$

となる。BCS と同様に，(19)の $\boldsymbol{k}$ についての和を状態密度を用いて表わ

し，さらに状態密度としては Fermi 面での値でおきかえる近似を使う。つまり

$$\sum_{k} \longrightarrow \Omega\int d\xi\rho(\xi) \sim \Omega\rho(0)\int d\xi$$

とすると，(19)は

$$1=\pi\rho(0)gk_{\mathrm{B}}T\sum_{\omega_n}{}'\frac{1}{\sqrt{\hbar^2\omega_n{}^2+|\varDelta|^2}} \tag{20}$$

と書ける。ただし ω_n についての和は，相互作用は $|\omega_n|<\omega_{\mathrm{D}}$ の範囲内に限られるものとして，この範囲内での和に限ることとした。

$$\sum_{\omega_n}{}'=\sum_{|\omega_n|<\omega_{\mathrm{D}}} \tag{21}$$

以上の方法は BCS と少し異なり，$|\omega_n|$ の大きい所で相互作用がないとした (BCS では $|\xi|$ の大きい所でないとした)。しかし結果は本質的に同じになることは，一番簡単な転移温度 T_{c} を計算してみればわかるであろう。T_{c} は $|\varDelta|=0$ になる温度で定義されるので，(20)より

$$1=\pi\rho(0)g\frac{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}}{\hbar}\sum_{\omega_n}{}'\frac{1}{|\omega_n|},\qquad \omega_n=\pi(2n+1)k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}/\hbar \tag{22}$$

より定まる。つまり

$$1=2\rho(0)g\sum_{0<n<\hbar\omega_{\mathrm{D}}/2\pi k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}}\frac{1}{2n+1} \tag{23}$$

からきまる。(23)の和は，ガンマ(Γ)関数の対数微分

$$\psi(z)=\frac{d}{dz}\log\Gamma(z) \tag{24}$$

で与えられる**ダイ-ガンマ関数** (di-gamma function) が

$$\psi(z)=-\gamma-\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{z+n}-\frac{1}{n+1}\right) \tag{25}$$

で与えられる*ことを用いれば

$$1=\rho(0)g\left\{\psi\left(\frac{1}{2}+\frac{\hbar\omega_{\mathrm{D}}}{\pi T_{\mathrm{c}}}\right)-\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right\} \tag{26}$$

となる。ふつう $\hbar\omega_{\mathrm{D}}$ は $k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{c}}$ に比べずっと大きいので，$\psi(z)$ の漸近展開

$$\psi(z)\sim\log z-\frac{1}{2z}-\frac{1}{12z^2}+\cdots \tag{27}$$

および

---

* γ は Euler の定数とよばれる定数で，$\gamma=0.57721\cdots$ である。たとえば数学公式III(岩波全書) p. 12 を見よ。

$$\psi\left(\frac{1}{2}\right)=-\log 4\gamma$$

を用いることができ，T_c は

$$k_B T_c=\frac{4\gamma}{\pi}\hbar\omega_D \exp\{-1/\rho(0)g\} \tag{28}$$

で与えられることになる。これは BCS または Bogoljubov の式(4·55)と本質的に同じである。

系の熱力学ポテンシャル Φ は，

$$\frac{\partial\Phi}{\partial g}=\frac{1}{g}\langle H_1\rangle=-\frac{1}{g^2}\Delta^2$$

より

$$\Phi_s-\Phi_n=\int_0^g\left(-\frac{\Delta^2}{g^2}\right)dg \tag{29}$$

(Φ_s, Φ_n はそれぞれ超伝導状態，常伝導状態での熱力学ポテンシャルである）を用いて求められ，これから比熱など熱力学関数が計算でき，その結果は BCS と全く同じである。

8-4 Ginzburg-Landau 方程式の導出

Ginzburg-Landau 方程式 G-L 方程式* は超伝導の現象論としては最もすぐれたもので，超伝導体の熱的性質，電磁気的性質をうまく説明する。ここでは G-L 方程式自身については簡単な説明にとどめ，主としてこれが Gor'kov の方法によって導出できることを示す。

G-L 方程式ではまず超伝導を特徴づける量としてオーダー・パラメータ $\Psi(\boldsymbol{r})$ を考え，これが 0 でない状態が超伝導であり，0 のときが常伝導状態とする。そして転移温度付近ではこれが次の方程式を満たしているとする。

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left\{\nabla-\frac{ie^*}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\right\}^2\Psi(\boldsymbol{r})+\{\alpha+\beta|\Psi(\boldsymbol{r})|^2\}\Psi(\boldsymbol{r})=0 \tag{30 a}$$

ただし $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ はベクトル・ポテンシャルで $\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}=\boldsymbol{H}$ である。m^*, e^* はそれぞれある定数である。α, β は温度の関数として

$$\alpha=a(T-T_c) \quad (a>0), \qquad \beta=一定>0 \tag{31}$$

であるとする。磁場のないとき，つまり $\boldsymbol{A}=0$ のときは，(30 a)の解 Ψ は

* V. L. Ginzburg and L. D. Landau: Zh. Eksp. Teor. Fiz. **20**, 350 (1951).

$\boldsymbol{r}$ によらなくなり，

$$\Psi=0 \qquad (T>T_c)$$

$$|\Psi|=\sqrt{\frac{a}{\beta}}\sqrt{T_c-T} \qquad (T<T_c)$$

となる。すなわち T_c 以上の温度では常伝導に，T_c 以下の温度で超伝導になることになる。

超伝導体の電磁気的性質としては，電流密度 $\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})$ が

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})=\frac{e^*\hbar}{2m^*i}\{\Psi^*(\boldsymbol{r})\nabla\Psi(\boldsymbol{r})-(\nabla\Psi^*(\boldsymbol{r}))\Psi(\boldsymbol{r})\}-\frac{e^{*2}}{mc}|\Psi(\boldsymbol{r})|^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \quad (30\,\mathrm{b})$$

と表わされるとする。つまり磁場があるときの Ψ を (30 a) から求め，それを (30 b) に代入すれば磁場のあるときの電流が得られる。1章でも述べたように，この第一項が無視できる場合は London 方程式になる。(30 a), (30 b)は量子力学における Schrödinger 方程式，電流密度の式にきわめてよく似ている。これは超伝導現象が量子力学的現象であることを示している。以下ではこの G-L 方程式を微視的理論から導出することを考える。

磁場のあるときの Green 関数の方程式 まず磁場のあるときのハミルトニアンは

$$H=\sum_\sigma\int\psi_\sigma^*(\boldsymbol{r})\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla-\frac{ie}{c\hbar}\boldsymbol{A}\right)^2-\mu\right\}\psi_\sigma(\boldsymbol{r})\,d^3\boldsymbol{r}$$

$$-g\int\psi_\uparrow{}^\dagger(\boldsymbol{r})\psi_\downarrow{}^\dagger(\boldsymbol{r})\psi_\downarrow(\boldsymbol{r})\psi_\uparrow(\boldsymbol{r})\,d^3\boldsymbol{r} \quad (32)$$

と書ける。前節と同じように温度 Green 関数 $\mathscr{G}(\boldsymbol{r}\tau,\boldsymbol{r}'\tau')$ の $\tau-\tau'$ についての Fourier 成分を $\mathscr{G}_{\omega_n}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ とすると，これの方程式は

$$\left\{i\omega_n+\frac{\hbar}{2m}\left(\nabla-\frac{ie}{c\hbar}\boldsymbol{A}\right)^2+\frac{\mu}{\hbar}\right\}\mathscr{G}_{\omega_n}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')+\frac{1}{\hbar}\Delta(\boldsymbol{r})\mathscr{F}_{\omega_n}{}^\dagger(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \quad (33)$$

$$\left\{i\omega_n-\frac{\hbar}{2m}\left(\nabla+\frac{ie}{c\hbar}\boldsymbol{A}\right)^2-\frac{\mu}{\hbar}\right\}\mathscr{F}_{\omega_n}{}^\dagger(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')+\frac{1}{\hbar}\Delta^*(\boldsymbol{r})\mathscr{G}_{\omega_n}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=0 \quad (33')$$

となることは前節と全く同じである。ただしこの場合，ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ が存在するため，$\mathscr{G}$, $\mathscr{F}$ は $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$ のみの関数ではなく，また Δ も $\boldsymbol{r}$ に依存している。

(33), (33′)を一般的に解くことはできないが，T_c 付近では Δ および $\mathscr{F}$ は小さいものと考えられるので，次のように近似的に解くことができる。常伝導状態での Green 関数を $\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ とすると，その方程式は

$$\left\{i\omega_n+\frac{\hbar}{2m}\left(\boldsymbol{\nabla}-\frac{ie}{c\hbar}\boldsymbol{A}\right)^2+\frac{\mu}{\hbar}\right\}\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{34}$$

または

$$\left\{i\omega_n-\frac{\hbar}{2m}\left(\boldsymbol{\nabla}'-\frac{ie}{c\hbar}\boldsymbol{A}'\right)^2-\frac{\mu}{\hbar}\right\}\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{34'}$$

である。ただし $\boldsymbol{\nabla}'\equiv(\partial/\partial\boldsymbol{r}')$, $\boldsymbol{A}'\equiv\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')$ と書いた。(33)の $\mathscr{G}_{\omega_n}$ は (34) の $\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0$ を使えば

$$\mathscr{G}_{\omega_n}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')-\int\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\frac{1}{\hbar}\Delta(\boldsymbol{r}_1)\mathscr{F}_{\omega_n}{}^\dagger(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}_1 \tag{35}$$

と書け，(33′)の $\mathscr{F}_{\omega_n}{}^\dagger$ は(34′)を使えば

$$\mathscr{F}_{\omega_n}{}^\dagger(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=\int\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r})\frac{1}{\hbar}\Delta^*(\boldsymbol{r}_1)\mathscr{G}_{\omega_n}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}_1 \tag{35'}$$

と表わされる。(35′)を(35)に代入すると

$$\begin{aligned}\mathscr{G}_{\omega_n}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=&\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\\&-\frac{1}{\hbar^2}\iint\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\Delta(\boldsymbol{r}_1)\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1)\Delta^*(\boldsymbol{r}_2)\mathscr{G}_{\omega_n}(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2\end{aligned} \tag{36}$$

となり，$\mathscr{G}_{\omega_n}$ に対する積分方程式が得られる。一方(36)を(35′)に代入すると

$$\begin{aligned}\mathscr{F}_{\omega_n}{}^\dagger(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')=&\frac{1}{\hbar}\int\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r})\Delta^*(\boldsymbol{r}_1)\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}_1\\&-\frac{1}{\hbar^3}\iiint\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r})\Delta^*(\boldsymbol{r}_1)\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\Delta(\boldsymbol{r}_2)\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}_2)\\&\times\Delta^*(\boldsymbol{r}_3)\mathscr{G}_{\omega_n}(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2d^3\boldsymbol{r}_3\end{aligned} \tag{37}$$

となる。T_c の近くでは Δ, $\Delta^\dagger$ は小さいので，Δ の高次の項を無視すれば，(36), (37)で右辺の最後の項の $\mathscr{G}_{\omega_n}$ を $\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0$ でおきかえることができる。

ギャップ方程式 上のような式を使うと，Δ^* に対する方程式が次のように得られる。

$$\begin{aligned}\Delta^*(\boldsymbol{r})=&g\frac{k_BT}{\hbar}\sum_{\omega_n}\mathscr{F}_{\omega_n}{}^\dagger(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})\\=&g\frac{k_BT}{\hbar^2}\sum_{\omega_n}\int\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r})\Delta^*(\boldsymbol{r}_1)\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}_1\\&-g\frac{k_BT}{\hbar^4}\sum_{\omega_n}\iiint\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r})\Delta^*(\boldsymbol{r}_1)\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\Delta(\boldsymbol{r}_2)\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}_2)\\&\times\Delta^*(\boldsymbol{r}_3)\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2d^3\boldsymbol{r}_3\end{aligned} \tag{38}$$

まず(38)の右辺第一項を調べる。これは

$$\int K(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1) \Delta^*(\boldsymbol{r}_1) d^3\boldsymbol{r}_1 \tag{39}$$

と書け，K は

$$K(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1) = g\frac{k_B T}{\hbar^2}\sum_{\omega_n}\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r})\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}) \tag{40}$$

で与えられる。ところで $\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0$ は(34)を満たしているが，磁場が小さいとすると，$\boldsymbol{A}=0$ のときの解を $\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ と書いて

$$\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')e^{i\varphi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')} \tag{41}$$

$$\varphi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \frac{e}{c\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{42}$$

と書くことができる。ただし $\nabla\cdot\boldsymbol{A}$ は $\boldsymbol{A}$ に比べて小さいものとして無視する。

(41), (42)を(40)に代入すると

$$K(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = K_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\exp\left\{\frac{2ie}{c\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\right\} \tag{43}$$

$$K_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = g\frac{k_B T}{\hbar^2}\sum_{\omega_n}\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}) \tag{44}$$

と書けるが，ここで $\boldsymbol{A}$ 自身は小さいものとして(43)を $\boldsymbol{A}$ で展開してしまう。また $K_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ は $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ が大きくなると急激に小さくなるので，(39)の $\Delta^*(\boldsymbol{r}_1)$ を $\boldsymbol{r}$ のまわりで展開する。これは Δ^* の空間変化が小さいときはよい近似であり，G-L 方程式自身も同じ仮定に基づいている。すると(39)は

$$\int K_0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\left[1+\frac{2ie}{c\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})+\frac{1}{2}\left(\frac{2ie}{c\hbar}\right)^2\{\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})\}^2\right]$$
$$\times\left[\Delta^*(\boldsymbol{r})+(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})\cdot\frac{\partial\Delta^*(\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}+\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}):\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}\partial\boldsymbol{r}}\Delta^*(\boldsymbol{r})\right] \tag{45}$$

となる*。ところで K_0 は磁場のない常伝導状態での Green 関数の積で表わされているので，その変数の大きさだけの関数で，方向にはよらない。したがって

---

* 第2の［　］内の最後の項は，$(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})$ というテンソルと $\partial^2\Delta(\boldsymbol{r})/\partial\boldsymbol{r}\partial\boldsymbol{r}$ というテンソルとの内積で，

$$\sum_\alpha\sum_\beta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})_\alpha(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})_\beta\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{r}_\alpha\partial\boldsymbol{r}_\beta}\Delta(\boldsymbol{r})$$

を表わす。

$$\int(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})K_0(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}_1=0$$

$$\int(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})_\alpha(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})_\beta K_0(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}_1=\frac{1}{3}\int R^2K_0(R)d^3\boldsymbol{R}\,\delta_{\alpha\beta}$$

が成り立つので，(45)を整理して $\boldsymbol{A}$ および $\partial\Delta^*/\partial\boldsymbol{r}$ について2次の項までを残すと

$$\Delta^*(\boldsymbol{r})\int K_0(R)\,d^3\boldsymbol{R}+\frac{1}{6}\left(\nabla+\frac{2ie}{c\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\right)^2\Delta^*(\boldsymbol{r})\int R^2K_0(R)\,d^3\boldsymbol{R} \tag{46}$$

となる。

ここで $K_0(R)$ の具体的な形を求めておこう。常伝導状態での Green 関数は

$$\begin{aligned}\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')&=\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{p}}\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{p})e^{i\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\\&=\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{p}}\frac{1}{i\omega_n-\xi_{\boldsymbol{p}}/\hbar}e^{i\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\end{aligned} \tag{47}$$

で与えられているから，まず $\boldsymbol{p}$ の方向について積分し，$\boldsymbol{p}$ の大きさについての積分はエネルギー $\xi_{\boldsymbol{p}}$ についての積分に直すと，

$$\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{2\pi m}{\hbar}\frac{1}{iR}\int d\xi\frac{e^{ipR}-e^{-ipR}}{i\omega_n-\xi/\hbar},\quad R=|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$$

となる。exp の肩で p を Fermi 運動量 p_{F} のまわりで展開し，$\hbar^2p_{\mathrm{F}}{}^2/2m=\mu$ であることに注意すると，

$$p=p_{\mathrm{F}}+(p-p_{\mathrm{F}})\sim p_{\mathrm{F}}+\xi_p\frac{m}{\hbar^2p_{\mathrm{F}}}=p_{\mathrm{F}}+\frac{\xi_p}{v_0\hbar}$$

($v_0=\hbar p_{\mathrm{F}}/m$ は Fermi 面上における電子の速さ)

であるから，ξ についての積分はすぐにできて

$$\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{R})=-\frac{m}{2\pi R}\exp\left(-\frac{|\omega_n|}{v_0}R\right)\times\begin{cases}e^{ip_{\mathrm{F}}R} & (\omega_n>0)\\ e^{-ip_{\mathrm{F}}R} & (\omega_n<0)\end{cases} \tag{48}$$

という結果になる。これからわかるように $\mathscr{G}^{00}$ は $R\gtrsim v_0/|\omega_n|\sim\hbar v_0/k_{\mathrm{B}}T$ になると急激に小さくなる。(48)を(44)に代入すれば次式が求まる。

$$\begin{aligned}K_0(\boldsymbol{R})&=g\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar^2}\sum_{\omega_n}\left(\frac{m}{2\pi R}\right)^2\exp\left(-2\frac{|\omega_n|}{v_0}R\right)\\&=g\frac{m^2k_{\mathrm{B}}T}{(2\pi\hbar)^2R^2}\frac{4}{\sinh\left(\dfrac{2\pi k_{\mathrm{B}}T}{v_0}R\right)}\end{aligned} \tag{49}$$

$K_0(R)$, $R^2K_0(R)$ の積分　(46)に現われる $K_0(R)$ についての積分は，(49)を用いても計算できるが，もっと直接的にもできる。まず(44)に(47)を代入して積分すると

$$\int K_0(R)d^3\boldsymbol{R}=g\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar^2}\sum_{\omega_n}{}'\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\boldsymbol{p}\frac{1}{i\omega_n-\xi_{\boldsymbol{p}}/\hbar}\,\frac{1}{-i\omega_n-\xi_{-\boldsymbol{p}}/\hbar}$$

$$=g\rho(0)k_{\mathrm{B}}T\sum_{\omega_n}{}'\int d\xi\frac{1}{\hbar^2\omega_n{}^2+\xi^2}$$

$$=g\rho(0)\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar}\sum_{\omega_n}{}'\frac{\pi}{|\omega_n|}$$

$$=2\rho(0)g\sum_{n>0}{}'\frac{1}{2n+1}$$

$$=\rho(0)g\log\frac{4\gamma\omega_{\mathrm{D}}}{\pi k_{\mathrm{B}}T}$$

と計算できる。ただし前節(22)の計算と同じ近似を使った。さらに T_c の表式を使えば，上式は

$$\int K_0(R)d^3\boldsymbol{R}=\rho(0)g\left(\log\frac{T_c}{T}-1\right) \tag{50}$$

となる。これと(38)の左辺の1を合わせたものが G-L 方程式(30 a)の $\boldsymbol{a}$ に対応しており，たしかに(31)という性質をもっていることがわかる。

(46)の最後の積分を同じようにして書き表わすと

$$\int R^2K_0(R)\,d^3\boldsymbol{R}=g\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar^2}\sum_{\omega_n}\frac{1}{\Omega^2}\sum_{\boldsymbol{p}}\sum_{\boldsymbol{p}'}\frac{1}{i\omega_n-\xi_{\boldsymbol{p}}/\hbar}\,\frac{1}{-i\omega_n-\xi_{\boldsymbol{p}'}/\hbar}$$

$$\times\int R^2e^{i(\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}')\cdot\boldsymbol{R}}d^3\boldsymbol{R}$$

となるが，この R についての積分は

$$\Omega\left(-\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{p}^2}\right)\delta_{\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}'}$$

に等しく，$\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{p}'$ についての和を積分におきかえて部分積分すると

$$\int R^2K_0(R)\,d^3\boldsymbol{R}=g\,k_{\mathrm{B}}T\sum_{\omega_n}\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\left(-\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{p}^2}\,\frac{1}{i\hbar\omega_n-\xi_{\boldsymbol{p}}}\right)\left(\frac{1}{-i\hbar\omega_n-\xi_{-\boldsymbol{p}}}\right)$$

$$=gk_{\mathrm{B}}T\sum_{\omega_n}\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}\,\frac{1}{i\hbar\omega_n-\xi_{\boldsymbol{p}}}\right)\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}\,\frac{1}{-i\hbar\omega_n-\xi_{-\boldsymbol{p}}}\right)$$

$$=gk_{\mathrm{B}}T\sum_{\omega_n}\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\,\frac{1}{(i\hbar\omega_n-\xi_{\boldsymbol{p}})^2(-i\hbar\omega_n-\xi_{\boldsymbol{p}})^2}\left(\frac{\hbar^2}{m}\boldsymbol{p}\right)^2$$

となるので，前と同様に $\boldsymbol{p}$ の積分を ξ についての積分に直して実行すると

$$\int R^2K_0(R)\,d^3\boldsymbol{R}=gk_{\mathrm{B}}T\frac{2\hbar^2}{m}\sum_{\omega_n}\rho(0)\int d\xi\frac{\xi+\mu}{\{(\hbar\omega_n)^2+\xi^2\}^2}$$

$$=\frac{2\mu}{m\hbar}\rho(0)\,g\,k_{\mathrm{B}}T\sum_{\omega_n}\frac{1}{|\omega_n|^3}\,\frac{\pi}{2}$$

$$=\rho(0)\,g\frac{\hbar^2}{m}\,\frac{\mu}{(\pi k_{\mathrm{B}}T)^2}\,\frac{7}{4}\zeta(3) \tag{51}$$

となる。ただし $\zeta(3)$ はツェータ (ζ) 関数で

$$\zeta(3)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^3}\sim 1.202\cdots$$

で与えられる。この(51)が(30 a)の $(\hbar^2/2m^*)$ に対応する。

$\varDelta$ の高次の項の計算　以上で(38)の $\varDelta^*$ に比例する項の係数が計算できたので，次に(38)の最後の項，$|\varDelta|^2\varDelta^*$ に比例する項の係数を求める。この項では $\varDelta^*$ の空間依存性は無視する*ことにすると，その最後の項は

$$-g\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar^4}|\varDelta(\boldsymbol{r})|^2\varDelta^*(\boldsymbol{r})\sum_{\omega_n}\iiint\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r})\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}_2)$$
$$\times\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r})\,d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2d^3\boldsymbol{r}_3$$

と書ける。さらにこの項では磁場の影響を考えないことにし，$\mathscr{G}_{\omega_n}{}^0$ として(47)を使うと

$$-\varDelta^*(\boldsymbol{r})|\varDelta(\boldsymbol{r})|^2\,g\frac{k_{\mathrm{B}}T}{\hbar^4}\sum_{\omega_n}\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\frac{1}{(\omega_n{}^2+\xi_{\boldsymbol{p}}{}^2/\hbar^2)^2}$$
$$=-\varDelta^*(\boldsymbol{r})|\varDelta(\boldsymbol{r})|^2\rho(0)\,g\frac{1}{(\pi k_{\mathrm{B}}T)^2}\frac{7}{8}\zeta(3) \tag{52}$$

と計算できる。(50), (51), (52)を使って(38)をまとめると

$$\left\{\log\frac{T_{\mathrm{c}}}{T}-\frac{7}{8}\zeta(3)\frac{1}{(\pi k_{\mathrm{B}}T)^2}|\varDelta(\boldsymbol{r})|^2\right\}\varDelta^*(\boldsymbol{r})$$
$$+\frac{7}{6}\zeta(3)\frac{\mu}{(\pi k_{\mathrm{B}}T)^2}\frac{\hbar^2}{4m}\left(\boldsymbol{\nabla}+\frac{2ie}{c\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\right)^2\varDelta^*(\boldsymbol{r})=0 \tag{53}$$

となり，$\varPsi$ として $\varDelta(\boldsymbol{r})$ に比例する量をとれば G-L 方程式(30 a)に一致することがわかる。

G-L の第二方程式　$\varPsi$ と $\varDelta$ の比例定数は，電流が(30 b)に一致するようにきめる。電流密度を第二量子化の形で表わすと

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})=\frac{e\hbar}{2mi}\left[\psi^*(\boldsymbol{r})\left\{\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\psi(\boldsymbol{r})\right\}-\left\{\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\psi^*(\boldsymbol{r})\right\}\psi(\boldsymbol{r})\right]$$
$$-\frac{e^2}{mc}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\psi^*(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{54}$$

と書けるので，これの平均値は

$$\langle\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\rangle=2\left[\frac{e\hbar}{2mi}\left(\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}'}-\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{r}}\right)\mathscr{G}(x,x')-\frac{e^2}{mc}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\,\mathscr{G}(x,x')\right]_{\boldsymbol{r}'\to\boldsymbol{r},\tau'\to\tau+0} \tag{55}$$

* $|\varDelta|$ 自身が小さく，またその空間変化や磁場の影響も小さいと考えている。

と Green 関数を使って表わすことができる。ただし初めの因子 2 はスピンについての和からくる。(55)は正確な式であるが，目的は磁場によってひきおこされる電流を磁場について 1 次までの近似で求めることなので，右辺第二項の $\mathcal{G}$ は $\boldsymbol{A}=0$ のものを使ってよい。するとこれは電子数密度 $\langle\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\rangle=n(\boldsymbol{r})$ にほかならないが，系は磁場のないときは一様なので，超伝導状態でも常伝導状態でも一定である。また第一項の $\mathcal{G}$ に(36)を代入した場合，まず $\mathcal{G}$ を常伝導の $\mathcal{G}^0$ でおきかえたものがくるが，これと(55)の第二項を合わせたものは常伝導状態での電流，つまり常伝導電流になり，これは小さいので無視する。したがって超伝導電流は $\varDelta$ の 2 次までの近似で

$$\langle \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\rangle=\frac{e\hbar}{im}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}'}-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{r}}\right)\frac{k_BT}{\hbar^3}\sum_{\omega_n}\left\{-\iint \mathcal{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\varDelta(\boldsymbol{r}_1)\mathcal{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)\right.$$
$$\left.\times\varDelta^*(\boldsymbol{r}_2)\mathcal{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}')d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2\right\}\Bigg|_{\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{r}} \qquad (56)$$
$$=-\frac{e\hbar}{im}\frac{k_BT}{\hbar^3}\sum_{\omega_n}\iint\left\{\frac{\partial\mathcal{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)}{\partial\boldsymbol{r}}\mathcal{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})-\mathcal{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\right.$$
$$\left.\times\frac{\partial\mathcal{G}_{\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\right\}\mathcal{G}_{-\omega_n}{}^0(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)\varDelta(\boldsymbol{r}_1)\varDelta^*(\boldsymbol{r}_2)d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2$$

で与えられる。

(56)の $\mathcal{G}^0$ に(41)を代入し，前と同じように $\varDelta$ や $\varDelta^*$ は $\boldsymbol{r}$ のまわりで展開し，またベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ についても展開して，それぞれ $\partial\varDelta/\partial\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{A}$ の 1 次までの項をとる。するとまず

$$-\frac{e\hbar}{im}|\varDelta(\boldsymbol{r})|^2\frac{k_BT}{\hbar^3}\sum_{\omega_n}\iint\left\{\frac{\partial\mathcal{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)}{\partial\boldsymbol{r}}\mathcal{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})-\mathcal{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\right.$$
$$\left.\times\frac{\partial\mathcal{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\right\}\mathcal{G}_{-\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1) \qquad (57\,\mathrm{a})$$

および

$$-\frac{e\hbar}{im}|\varDelta(\boldsymbol{r})|^2\frac{2ie}{c\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\frac{k_BT}{\hbar^3}\sum_{\omega_n}\iint\mathcal{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\mathcal{G}_{-\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)$$
$$\times\mathcal{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2 \qquad (57\,\mathrm{b})$$

という項が現われるが，この二つの項は 0 になることが示される。こうして残る項は

$$\langle \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\rangle=C\left\{\frac{e\hbar}{im}\left(\varDelta\frac{\partial\varDelta^*}{\partial\boldsymbol{r}}-\varDelta^*\frac{\partial\varDelta}{\partial\boldsymbol{r}}\right)-\frac{4e^2}{mc}|\varDelta(\boldsymbol{r})|^2\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\right\} \qquad (58)$$

という形にまとめられる。ただし C は

$$C=\frac{1}{3}\frac{k_{\rm B}T}{\hbar^3}\sum_{\omega_n}\iint\left\{\frac{\partial\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)}{\partial\boldsymbol{r}}\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})-\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\frac{\partial\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\right\}$$
$$\times(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2 \qquad (59)$$

で与えられる定数である。

(57 a, b)の積分と(59)は，$\mathscr{G}^{00}$ の Fourier 変換を用いればすぐに計算できる。まず(57 a)の積分は，$\mathscr{G}^{00}$ が相対距離だけの関数であることから，$\boldsymbol{r}_1$, $\boldsymbol{r}_2$ の方向について積分すれば 0 になることはすぐにわかる。次に(57 b)の積分は

$$\frac{k_{\rm B}T}{\hbar^3}\sum_{\omega_n}\iint\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2$$
$$=k_{\rm B}T\sum_{\omega_n}\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\frac{1}{(i\hbar\omega_n-\xi_{\boldsymbol{p}})^2}\frac{1}{(-i\hbar\omega_n-\xi_{-\boldsymbol{p}})}$$
$$\simeq k_{\rm B}T\,\rho(0)\sum_{\omega_n}\int d\xi\frac{-i\hbar\omega_n-\xi}{(\hbar\omega_n)^2+\xi^2}$$

となり，分子の第一項は ω_n の，第二項は ξ の奇関数なので 0 になる。また(59)の C は次のようになる。

$$C=\frac{1}{3}\frac{k_{\rm B}T}{\hbar^3}\sum_{\omega_n}\iint d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2\frac{1}{\Omega^3}\sum_{\boldsymbol{p}_1}\sum_{\boldsymbol{p}_2}\sum_{\boldsymbol{p}_3}$$
$$\times\frac{1}{2i}\left[\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}_3}\exp i\{\boldsymbol{p}_1\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)+\boldsymbol{p}_2\cdot(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})+\boldsymbol{p}_3\cdot(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)\}\right.$$
$$\left.\times\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{p}_1)\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{p}_2)\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{p}_3)(-i)(\boldsymbol{p}_1+\boldsymbol{p}_2)\right]$$
$$=\frac{1}{3}\frac{k_{\rm B}T}{\hbar^3}\int\frac{d^3\boldsymbol{p}}{(2\pi)^3}\{\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{p})\}^2\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}\{\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^{00}(-\boldsymbol{p})\}\cdot\boldsymbol{p}$$
$$=\frac{1}{3}\rho(0)\,k_{\rm B}T\int d\xi\frac{2(\xi+\mu)}{\{(\hbar\omega_n)^2+\xi^2\}^2}$$
$$=\frac{2}{3}\rho(0)\,\mu\frac{1}{(\pi k_{\rm B}T)^2}\frac{7}{8}\zeta(3)$$

(58)は

$$\Psi(r)=\sqrt{C}\,\Delta(\boldsymbol{r})$$

とおけば，G-L 方程式の電流の式(30 b)で

$$e^*=2e,\qquad m^*=2m$$

とおいたものに一致する。この e^* と m^* は電子が 2 個ずつ対になって運動していることを表わし，G-L 方程式の Ψ は Cooper 対の波動関数の性質をもっているものと解釈される。

8-5 Heisenberg スピン系(強磁性)

Green 関数の切断を使うよい例として，**1-5** の**d**)で述べた Heisenberg スピン系の強磁性の場合を考える。ハミルトニアンは(1·73)，すなわち

$$H=-2J\sum_{(i,j)}S_i\cdot S_j=-2J\sum_{(i,j)}\left\{S_i^zS_j^z+\frac{1}{2}(S_i^+S_j^-+S_i^-S_j^+)\right\} \quad (60)$$

で与えられる。ただし和は互いに隣り合った格子点の対についてとる。また $S_i^\pm$ は(1·78)で定義したもので，その交換関係は

$$[S_i^+, S_j^-]=2S_i^z\delta_{ij}, \quad [S_i^+, S_j^z]=-S_i^+\delta_{ij}, \quad [S_i^-, S_j^z]=S_i^-\delta_{ij} \quad (61)$$

で与えられる。Green 関数としては (6·8 a) と同様に有限温度で定義した遅延 Green 関数を使うことにし，A としてS_i^+, B として S_j^- をとる。つまり

$$G_{ij}(t-t')=-i\theta(t-t')\langle[S_i^+(t),\ S_j^-(t')]\rangle \quad (62)$$

とし，これを

$$G_{ij}(t-t')=\langle\langle S_i^+(t)\,;\,S_j^-(t')\rangle\rangle \quad (62')$$

とも書くことにする。

$G_{AB}{}^{\mathrm{R}}(t-t')$ の運動方程式は(6·8 a)に示したように

$$i\frac{\partial}{\partial t}G_{AB}{}^{\mathrm{R}}(t-t')=\langle[A,\ B]_\pm\rangle\delta(t-t')-\frac{1}{\hbar}\langle\langle[H,\ A(t)]\,;\,B(t')\rangle\rangle \quad (63)$$

で与えられ，(62)に対しては

$$i\frac{\partial}{\partial t}G_{ij}(t-t')=2\langle S_i^z\rangle\delta_{ij}\delta(t-t')$$
$$-\frac{2J}{\hbar}\sum_{\rho}\langle\langle(S_i^zS_{i+\rho}^+-S_i^+S_{i+\rho}^z)_t\,;\,S_j^-(t')\rangle\rangle \quad (64)$$

となる。$\boldsymbol{\rho}$ は一つの格子点からすぐ隣の格子点へのベクトルである。

最も簡単な近似　ここで(64)の最後の項に対して，次のように最も簡単な切断をする。

$$\begin{aligned}&\langle\langle(S_i^zS_{i+\rho}^+)_t\,;\,S_j^-(t')\rangle\rangle \longrightarrow \langle S_i^z\rangle\langle\langle S_{i+\rho}^+(t)\,;\,S_j^-(t')\rangle\rangle\\&\langle\langle(S_i^+S_{i+\rho}^z)_t\,;\,S_j^-(t')\rangle\rangle \longrightarrow \langle S_{i+\rho}^z\rangle\langle\langle S_i^+(t)\,;\,S_j^-(t')\rangle\rangle\end{aligned} \quad (65)$$

すると(64)に含まれる Green 関数は G_{ij} と $G_{i+\rho,j}$ のみとなり，さらに系は空間的に一様であるから，$\langle S_i^z\rangle$ は i によらないことを用いると，(64)は

$$i\frac{d}{dt}G_{ij}(t-t')=2\langle S^z\rangle\delta_{ij}\delta(t-t')$$
$$-\frac{1}{\hbar}2J\langle S_z\rangle\sum_{\rho}\{G_{i+\rho,j}(t-t')-G_{ij}(t-t')\} \quad (66)$$

となる。(66)は $G_{ij}(t-t')$を Fourier 変換すればすぐに解ける。つまり

$$G_{ij}(t-t')=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}e^{-i\omega(t-t')}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}_i-\boldsymbol{R}_j)}G_{\boldsymbol{k}}(\omega) \quad (67)$$

と書けば，(66)はすぐに解けて

$$G_{\boldsymbol{k}}(\omega)=\frac{2\langle S^z\rangle}{\omega-\epsilon_{\boldsymbol{k}}/\hbar} \tag{68}$$

ただし

$$\epsilon_{\boldsymbol{k}}=2Jz\langle S^z\rangle\{1-\gamma(\boldsymbol{k})\} \tag{69}$$

$$\gamma(\boldsymbol{k})=\frac{1}{z}\sum_{\rho}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\rho}} \tag{70}$$

である。z は一つの格子点のまわりの最近接格子点の数である。(69)の $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ はスピン波のエネルギーを与えており，0 K での値(1·92)の S を $\langle S^z\rangle$ でおきかえたものになっている。(68)はまだ $\langle S^z\rangle$ を含んでおり，これをきめることが必要である。まず簡単のため各スピンの大きさ S が 1/2 のときを考える。このときは(1·81)の関係式で

$$\boldsymbol{S}^2=S(S+1)=3/4, \qquad S_z{}^2=1/4$$

とおけば

$$S^+S^-=\frac{1}{2}+S^z \tag{71}$$

となり，また(61)の交換関係を使えば

$$S^-S^+=\frac{1}{2}-S^z \tag{71'}$$

が成り立つ。ここで(6·75)を用いれば

$$\begin{aligned}\langle S_j{}^-(t')S_i{}^+(t)\rangle&=\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\, e^{-i\omega(t-t')}\{G_{ij}(\omega+i\eta)-G_{ij}(\omega-i\eta)\}\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\\&=\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\, e^{-i\omega(t-t')}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}_i-\boldsymbol{R}_j)}\\&\quad\times\{G_{\boldsymbol{k}}(\omega+i\eta)-G_{\boldsymbol{k}}(\omega-i\eta)\}\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\end{aligned} \tag{72}$$

と平均値が計算できる。この式で $i=j$，$t=t'$ とおき，(68)と(71′)を用いれば

$$\frac{1}{2}-\langle S^z\rangle=\frac{2\langle S^z\rangle}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{1}{e^{\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}-1} \tag{73}$$

と $\langle S^z\rangle$ に対する方程式が得られる。(73)は次のように簡単化することができる。

$$\frac{1}{2}=\frac{1}{N}\langle S^z\rangle\sum_{\boldsymbol{k}}\left(1+\frac{2}{e^{\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}-1}\right)=\langle S^z\rangle\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\coth\left(\frac{\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}{2}\right)$$

さらに $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ として(69)を代入すると

$$\frac{1}{2\langle S^z\rangle}=\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\coth\left(\frac{Jz\langle S^z\rangle\{1-\gamma(\boldsymbol{k})\}}{k_\mathrm{B}T}\right) \tag{74}$$

と $\langle S^z\rangle$ に対する超越方程式になる。

(74)式の解 (74)の解を解析的に求めることはできないが，次の二つの場合には解の性質を調べることができる。まず十分低温の場合，$\langle S^z\rangle\neq 0$ とすると，$T=0\,\mathrm{K}$ では右辺は1になるので

$$\langle S^z\rangle=\frac{1}{2} \qquad (T=0\,\mathrm{K})$$

になる。これは全部のスピンが z 方向を向いてそろっている基底状態を表わしている。0 K ではないが十分低温の場合は，(74) の $\boldsymbol{k}$ についての和を実行しなければならない。それには $\gamma(\boldsymbol{k})$ の関数形を知る必要があるが，これはスピンがどんな結晶格子上にあるかによって異なる。最も簡単な単純立方格子の場合は $z=6$ であり，格子定数を a とすると

$$\gamma(\boldsymbol{k})=\frac{1}{3}(\cos k_xa+\cos k_ya+\cos k_za)$$

となるので，これを $|\boldsymbol{k}|$ の小さい所で展開する。すると

$$1-\gamma(\boldsymbol{k})=\frac{1}{6}(k_x{}^2+k_y{}^2+k_z{}^2)\,a^2-\frac{1}{72}(k_x{}^4+k_y{}^4+k_z{}^4)\,a^4+\cdots$$

となることがわかる。そこで $\boldsymbol{k}$ についての和を

$$\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}} \longrightarrow \frac{\Omega}{N}\,\frac{1}{8\pi^3}\iiint_{-\pi/a}^{\pi/a}dk_xdk_ydk_z$$

と積分に直し，

$$\left(\frac{J\langle S^z\rangle}{k_\mathrm{B}T}\right)^{1/2}k_\alpha a=\kappa_\alpha \qquad (\alpha=x,\,y,\,z)$$

と変数変換をする。そして(74)の右辺で

$$\coth\frac{\epsilon}{2k_\mathrm{B}T}=1+\frac{2}{e^{\beta\epsilon}-1}$$

と書き直すと，右辺は

$$1-\frac{1}{8\pi^3}\,\frac{\Omega}{N}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{J\langle S^z\rangle}\right)^{3/2}\frac{1}{a^3}\iiint d\kappa_xd\kappa_yd\kappa_z\,f(\boldsymbol{\kappa})$$

$$f(\boldsymbol{\kappa})=\frac{1}{e^{\epsilon'}-1}, \qquad \epsilon'=(\kappa_x{}^2+\kappa_y{}^2+\kappa_z{}^2)-\frac{1}{12}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{J\langle S^z\rangle}\right)(\kappa_x{}^4+\kappa_y{}^4+\kappa_z{}^4)+\cdots$$

と書ける。ϵ' の第一項は T を含まず，第二項は T に比例している。以下第三項は T^2 に比例し，高次の項ほど T のべきが高くなるので

$$\epsilon'=\epsilon_0{}'+\epsilon_1{}'+\epsilon_2{}'+\cdots$$

と T で展開をし，$f(\boldsymbol{\kappa})$ も T で展開してしまう。すると(74)は

$$\frac{1}{2\langle S^z\rangle}=1-\frac{1}{8\pi^3}\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{J\langle S^z\rangle}\right)^{3/2}\left\{F_0+\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{J\langle S^z\rangle}\right)F_1+\left(\frac{k_\mathrm{B}T}{J\langle S^z\rangle}\right)^2F_2+\cdots\right\} \tag{75}$$

という形になる。ただし $\Omega=Na^3$ を使い，$F_0,\,F_1,\cdots$ は T によらない定数である。(75)より $\langle S^z\rangle$ は

$$\langle S^z\rangle=\frac{1}{2}-T^{3/2}(a_1+a_2T+a_3T^2+\cdots)$$
$$-b_1T^3-\cdots \tag{76}$$

という形になり，係数は(75)から決めることができる。

(76)は強磁性体の自発磁化 ($\langle S^z\rangle$ に比例する)の低温における温度依存性を示している。これが温度が上がると減少するのは，スピン波が熱的に励起するためで，スピン波のエネルギーと波数 $\boldsymbol{k}$ との関係，およびスピン波間の相互作用によって異なる依存性を示す。このスピン波間の相互作用をどう取り扱うかについては，後に述べるようにいろいろな方法があり，その正確な結果として得られる $\langle S^z\rangle$ の温度依存性は(76)とは違っている。これは Green 関数の切断の方法が簡単すぎるためで，もっとよい切断法については後で述べることにする。

以上は $\langle S^z\rangle$ が 1/2 に近い低温領域についての話であったが，次に $\langle S^z\rangle=0$ になる Curie 温度 T_c の式を求める。(74)で $\langle S^z\rangle$ が十分小さいとして右辺を展開すると

$$\frac{1}{2\langle S^z\rangle}=\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{k_BT}{Jz}\frac{1}{1-\gamma(\boldsymbol{k})}\frac{1}{\langle S^z\rangle}+O(\langle S^z\rangle)$$

となるので，Curie 温度 T_c は

$$\frac{1}{2}=\frac{k_BT_c}{Jz}\frac{1}{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{1}{1-\gamma(\boldsymbol{k})} \tag{77}$$

できまる。(77)の和の中の $1-\gamma(\boldsymbol{k})$ は，どんな結晶格子に対しても $|\boldsymbol{k}|$ の小さいときは k^2 に比例している。$\boldsymbol{k}$ についての和を積分に直し，$\boldsymbol{k}$ の大きさ k についての積分にすると，d 次元のときは $\int k^{d-1}dk$ が現われるので，k の小さいときの積分の形は

$$\int k^{d-1}\frac{1}{k^2}dk=\int k^{d-3}\,dk$$

となる。したがって $d=1, 2$ ではこの積分は発散し，$T_c=0$ になる。つまり 1 次元，2 次元格子では Heisenberg スピン系は強磁性にならないことになる。3 次元格子の場合は，この積分は有限の値を与え，T_c も有限になる。積分は数値的に計算され，たとえば単純立方格子では $kT_c/J=1.987$ になることがわかっている。

近似の改良(I)　以上のように(65)という切断をすると，強磁性体の 0 K から T_c までの性質に，定性的に正しい結果を与えている。しかし前にも述べたように低温での自発磁化 $\langle S^z\rangle$ の温度依存性に対しては正確な結果と合っていない。この点の改良についてはいろいろな近似が考え出されているが，その一つとして次のものがある。

$S=1/2$ のときは，S^z と S^+, S^- との関係は(71)と(71′)の二つの表わし方がある。そこでこの二つを適当に結合させ，

$$S^z=\frac{1}{2}\{\alpha+(1-\alpha)S^+S^--(1+\alpha)S^-S^+\} \tag{78}$$

という恒等式をつくることができる。ただし α は任意の定数(温度の関数であってもよい)である。(78)を(64)の高次の Green 関数に代入し，たと

えば $l \neq m$ として

$$\langle\langle S_l^+ S_l^- S_m^- ; S_n^- \rangle\rangle \longrightarrow \langle S_l^+ S_l^- \rangle \langle\langle S_m^+ ; S_n^- \rangle\rangle + \langle S_l^- S_m^+ \rangle \langle\langle S_l^+ ; S_n^- \rangle\rangle \tag{79}$$

というように切断する。その結果として

$$\langle\langle S_l^z S_m^+ ; S_n^- \rangle\rangle \longrightarrow \langle S^z \rangle \langle\langle S_m^+ ; S_n^- \rangle\rangle - \alpha \langle S_l^- S_m^+ \rangle \langle\langle S_l^+ ; S_m^- \rangle\rangle \tag{80}$$

という形が得られ，これは $\alpha=0$ のときにのみ(65)に一致する。ここで(78)の α として何をとったらよいかを考えてみる。0 K 近くでは S^z はほぼ 1/2 に等しく，$\langle S^- S^+ \rangle \sim 0$ なので α としては 1 に近い数をとればよい。また Curie 温度 T_c 付近では $\langle S^z \rangle$ はほぼ 0 になり $\langle S^+ S^- \rangle \sim \langle S^- S^+ \rangle$ なので，$\alpha \sim 0$ にとればよいことがわかる。つまり α としては低温で 1，T_c で 0 になる量をとればよいであろうから

$$\alpha = 2\langle S^z \rangle \tag{81}$$

とする。

この方法は Callen によって提唱されたもので*，計算は前の方法(これは Tyablikov** によって初めて提唱された)に比べてかなり複雑になるが，その結果は(76)の T^3 の項がなく，相互作用の影響は T^4 から始まっている。これは後に述べる正確な結果(**9-3**参照)と合っており，一応よい近似になっている。

近似の改良(II)　次に $S>1/2$ の場合の方法について簡単に述べておく。このときは

$$G_{ij}(t) \equiv \langle\langle S_i^+(t) ; \exp(aS_j^z) S_j^- \rangle\rangle \tag{82}$$

という Green 関数を考え，その運動方程式をつくると

$$i\frac{\partial}{\partial t} G_{ij}(t) = \langle [S^+, e^{aS^z} S^-] \rangle \delta_{ij} - \frac{2J}{\hbar} \sum_{\rho} \langle\langle (S_i^z S_{i+\rho}^+ - S_i^+ S_{i+\rho}^z)_t ; e^{aS_j^z} S_j^- \rangle\rangle \tag{83}$$

となるが，右辺第二項は前に述べたような Tyablikov または Callen の切断をする。第一項の平均値は次のように計算できる。

$$[S^+, (S^z)^n] = \{(S^z - 1)^n - (S^z)^n\} S^+ \tag{84}$$

であるから

$$\Theta(a) = \langle [S^+, e^{aS^z} S^-] \rangle = 2\langle e^{aS^z} S^z \rangle + (e^{-a} - 1) \langle e^{aS^z} S^+ S^- \rangle$$

となる。ところが

---

* H.B. Callen: Phys, Rev. **130** (1963), 890.

** S.V. Tyablikov: Ukrain. Math. Zh. **11** (1959), 287.

$$S^+S^-=S(S+1)-(S^z)^2+S^z$$

であるから

$$\Theta(a)=S(S+1)(e^{-a}-1)\langle e^{aS^z}\rangle+(e^{-a}+1)\langle e^{aS^z}S^z\rangle \\ -(e^{-a}-1)\langle e^{aS^z}S_z^{\,2}\rangle \tag{85}$$

となるので

$$\Omega(a)\equiv\langle e^{aS^z}\rangle \tag{86}$$

を定義すると

$$\Theta(a)=S(S+1)(e^{-a}-1)\Omega(a)+(e^{-a}+1)\Omega'(a)-(e^{-a}-1)\Omega''(a) \tag{85$'$}$$

と表わされる。

一方(82)の Green 関数を用いて計算できる平均値は，$i=j$, $t=0$ とおいて

$$\psi(a)\equiv\langle e^{aS^z}S^-S^+\rangle=S(S+1)\Omega(a)-\Omega'(a)-\Omega''(a) \tag{87}$$

であり，実際適当な切断のもとで(66)を解いた結果は

$$\psi(a)=\Phi\Theta(a) \tag{88}$$

という形になる*。ただし Φ は a によらないある温度の関数である。(87)に(88), (85′)を代入して整理すると

$$\Omega''(a)+\frac{1+\Phi+\Phi e^{-a}}{1+\Phi-\Phi e^{-a}}\Omega'(a)-S(S+1)\Omega(a)=0 \tag{89}$$

という Ω に対する微分方程式が得られる。

(89)は2階の微分方程式であるから，Ω をきめるためには境界条件が2個必要である。その一つは

$$\Omega(0)=1 \tag{90}$$

であることはすぐにわかる。もう一つとして S^z に対する恒等式

$$\prod_{p=-S}^{S}(S^z-p)=0$$

の平均値を Ω で表わした式

$$\prod_{p=-S}^{S}\left(\frac{\partial}{\partial a}-p\right)\Omega(a)\bigg|_{a=0}=0 \tag{91}$$

を使う。(90), (91)のもとで(89)を解くことができ，これから $\langle S^z\rangle$ などを求めることができる。実際 Callen はこの方法を用いてよい結果を得たのである。

スピン演算子に対しては Wick の定理は成立せず，摂動計算をすると

---

* ψ が Θ に比例することは，(83)の右辺第一項以外は Green 関数の1次であり，第一項は Θ に比例しているため G 自身が Θ に比例していることからわかる。

き Feynmann グラフを使うことができない。そこでここで述べた Green 関数の切断の方法がきわめて有力になる。この方法は前にも述べたように物理的意味がはっきりしないという欠点があるが，場合によっては非常によい結果を与える。そのためいろいろな切断方法が実行され，興味ある結果を与えている。たとえば 2 次元 Heisenberg モデルで，ある切断をすると，自発磁化はどの温度でも存在しないが，帯磁率はある温度以下で∞になるという結果を与える*。この結果が正しいかどうかはまだ確実ではなく，今後の研究に待つ問題といえる。

演習問題 8.

1. (56) 式より (58) 式を導出せよ。
2. (65) 式の近似が，T_c に対して分子場近似と異なるのはなぜか。
3. (84) 式を証明せよ。

---

* V. Mubayi and R. V. Lange, Phys. Rev. **178** (1969), 882.

9. 素励起，集団運動

9-1 基本的な考え方

0 K 付近における系の性質は，基底状態に近い励起状態の性質によってきまる。このことは，状態和

$$Z=\sum_{\alpha}\exp(-E_{\alpha}/k_{\mathrm{B}}T)$$

を考えてみればよい。各状態のエネルギー E_{α} を基底状態のエネルギー E_0 から測って

$$E_{\alpha}=E_0+\epsilon_{\alpha}$$

と書くと，E_0 が最低エネルギーであるから，励起エネルギー ϵ_{α} はすべて正である。したがって Z は

$$Z=\exp(-E_0/k_{\mathrm{B}}T)\sum_{\alpha}\exp(-\epsilon_{\alpha}/k_{\mathrm{B}}T)$$

と表わされる。この α についての和には，$\epsilon_{\alpha}\gg k_{\mathrm{B}}T$ からはほとんど寄与がなく，重要な状態は $k_{\mathrm{B}}T$ またはそれ以下の励起エネルギーをもったものである。したがって十分低温では，十分低い励起エネルギーをもった状態だけを考えればよいことになる。

そこで問題は，これらの低い励起エネルギーの状態をどのようにして求めるかになる。これに対する一つの解答は古典的な系からの類推によって得られる。基底状態に相当する古典系での状態は，力学的な平衡状態であり，平衡状態では系の各粒子に働く力の合力は 0 になっている。励起状態は各粒子が平衡点からずれて運動をしている状態に対応するが，励起エネルギーが小さな状態は，このずれが小さい場合に相当する。この場合は，粒子に働く力はずれに比例すると考えてよいので，各粒子は平衡点のまわりに単振動をしているものと考えられる。しかし粒子間に相互作用がある

場合は，各粒子の単振動は独立には行なわれない。第1の粒子が平衡点からずれれば，隣の第2の粒子は平衡点にいても力を受け，振動を始めようとする。こうして一つの粒子の運動は他の粒子の運動をひきおこし，振動は波動となって系全体を伝播する。結晶格子をつくる原子の振動がこの例で，振動は波となって結晶全体に広がり，これを量子化したものが前述の**フォノン**であった。

基準座標　以上のことを式で示すと次のようになる。各粒子の平衡点からのずれを $\boldsymbol{q}_j$ と書き，受ける力を $\boldsymbol{f}_j$ とすると，

$$\boldsymbol{f}_j=\sum_i \boldsymbol{\Gamma}_{ji}\cdot\boldsymbol{q}_i$$

と，力はずれの1次に比例するものと考える。するとある粒子の運動方程式に他の粒子の座標が入り，連立微分方程式を解かねばならない。そこで $\boldsymbol{q}_i$ の適当な1次変換

$$\boldsymbol{Q}_\alpha=\sum_i U_{\alpha i}\boldsymbol{q}_i \qquad (1)$$

をつくり，

$$\ddot{\boldsymbol{Q}}_\alpha=-k_\alpha\boldsymbol{Q}_\alpha \qquad (2)$$

という形にする。(2)は $\boldsymbol{Q}_\alpha$ が単振動をすることを表わしており，この $\boldsymbol{Q}_\alpha$ を**基準座標** (normal mode) という。こうして平衡点付近での小さな運動は，いくつかの基準座標の単振動(**基準振動**)の重ね合わせで近似できることになる。

量子力学においても，低い励起エネルギーの励起状態は，こういう基準振動を量子化したもので近似できる。これを数学的に表わすと次のようになる。系のハミルトニアンを H とし，その基底状態を $|0\rangle$，そのエネルギーを E_0 とする，

$$H|0\rangle=E_0|0\rangle \qquad (3)$$

ここで

$$[H,\ A_\alpha{}^\dagger]|0\rangle=\epsilon_\alpha A_\alpha{}^\dagger|0\rangle \qquad (4)$$

という関係を満たす演算子 $A_\alpha{}^\dagger$ が見つかったとすると，

$$|\alpha\rangle=A_\alpha{}^\dagger|0\rangle \qquad (5)$$

という状態は H の固有状態で，そのエネルギーは $E_0+\epsilon_\alpha$ になることが次のようにしてわかる。

$$\begin{aligned}H|\alpha\rangle&=HA_\alpha{}^\dagger|0\rangle=(A_\alpha{}^\dagger H+[H,\ A_\alpha{}^\dagger])|0\rangle\\&=A_\alpha{}^\dagger E_0|\alpha\rangle+\epsilon_\alpha A_\alpha{}^\dagger|0\rangle=(E_0+\epsilon_\alpha)|\alpha\rangle\end{aligned}$$

したがって $\epsilon_\alpha>0$ ならば，(5)の $|\alpha\rangle$ は励起エネルギー ϵ_α の励起状態を表わしている。一方 $A_\alpha{}^\dagger$ の Hermite 共役演算子を A_α とすると，$A_\alpha|0\rangle$ は

$$HA_\alpha|0\rangle=(E_0-\epsilon_\alpha)A_\alpha|0\rangle$$

と，エネルギー $E_0-\epsilon_\alpha$ の状態になっている。$\epsilon_\alpha>0$ のときは，これは E_0 より低く，$|0\rangle$ が基底状態であるという仮定に反する。したがって

$$A_\alpha|0\rangle=0 \tag{6}$$

でなければならない。$\epsilon_\alpha<0$ のときは，$A_\alpha{}^\dagger$ と A_α の役目を入れかえればよい。

例 強磁性体の Heisenberg モデルでは，**1-5** の **d**) で述べたように，基底状態は(1·87)で与えられ，(1·91)で与えられる励起状態 $|\boldsymbol{k}\rangle$ (スピン波に対応する)は

$$|\boldsymbol{k}\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}}S_j{}^-|0\rangle$$

と書ける。つまり

$$A_\alpha{}^\dagger=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_j}S_j{}^-$$

とすれば，(4) は正確に成り立っている。このとき A_α は $S_j{}^+$ の1次結合で与えられ，(1·87)つまり $S_j{}^+|0\rangle=0$ であるから，(6)も成り立っている。

素励起 古典的な系で平衡点のまわりの微小振動を量子化したとすると A_α, $A_\alpha{}^\dagger$ は Bose 的な交換関係を満たし，また $A_\alpha{}^\dagger A_\beta{}^\dagger|0\rangle$ も系の他の励起状態を表わし，そのエネルギーは $E_0+\epsilon_\alpha+\epsilon_\beta$ で与えられるものと考えられる。さらに一般的な励起状態は α という基準振動がどのくらいの励起状態にあるかを指定することによって表わされる。つまり

$$\prod_\alpha\frac{1}{\sqrt{n_\alpha!}}(A_\alpha{}^\dagger)^{n_\alpha}|0\rangle \tag{7}$$

が一般的な励起状態を表わすと考えてよい。これは α という Bose 粒子が n_α 個存在する状態であり，励起状態はこういう粒子の集団と考えられる。この意味で A_α, $A_\alpha{}^\dagger$ に相当する粒子を**素励起** (elementary excitation) とよぶ。ただし Fermi 粒子系では，(4)を満たす $A_\alpha{}^\dagger$ としては必ずしも Bose の交換関係を満たさないこともあるが，この場合も素励起とよんでいる。いろいろな素励起の中で，すべての粒子が同等に寄与しているものと，特別の粒子がとくに大きな寄与をするものとがある。このとき前者を**集団励起**(collective excitation) または**集団運動**(collective motion) とよび，後者を**個別励起**(individual excitation)とよぶ。

(4) を正確に満たすような $A_\alpha{}^\dagger$ と $|0\rangle$ が見つかることはきわめて例外的で，ほとんどの場合は近似的なものを見つけることが問題になる。またあ

る近似で $A_\alpha{}^\dagger$ や $|0\rangle$ が見つかったとしても，(7)を励起状態とする近似はもっと悪くなる。これはいろいろな $A_\alpha{}^\dagger$ の間に相互作用があるためで，この相互作用を見つけるのも一つの問題である。また A_α, $A_\alpha{}^\dagger$ は，正確に Bose の交換関係を満たしていない場合も多く，その場合の取り扱いも問題になる。以下ではいくつかの例について，素励起，集団励起を近似的に求めてみる。

9-2 相互作用のある Fermi 粒子系

まず例として相互作用をしている Fermi 粒子系を考える。そのハミルトニアンを

$$H=\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}\sigma}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{q}}V(\boldsymbol{q})\sum_{\substack{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'\\ \sigma\ \sigma'}}a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q},\sigma'}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}'\sigma'}a_{\boldsymbol{k}\sigma} \tag{8}$$

$$\epsilon_{\boldsymbol{k}}=\frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m} \tag{9}$$

と書く。$V(\boldsymbol{q})$ は相互作用ポテンシャルの Fourier 成分であるが，以下では相互作用が短距離でのみ働く反発力の場合と，長距離まで働く Coulomb 力の二つの場合を念頭において話を進める。

この系の励起状態を **9-1** で述べた方法に従って考える。(5)の $A_\alpha{}^\dagger$ として，粒子数を保存するよう

$$A_{\boldsymbol{q}}{}^\dagger(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')=a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}\sigma'} \tag{10}$$

ととる。ただし第一近似として，基底状態は相互作用のないときの $\boldsymbol{k}$ 空間での Fermi 球で表わされると考えて，(10)の $\boldsymbol{k}$ は Fermi 球の内部，$\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$ は外部にあるものとする。つまり

$$|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|>k_{\mathrm{F}},\qquad |\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}} \tag{10'}$$

としておく。(10)と H との交換関係は

$$\begin{aligned}[H,\ A_{\boldsymbol{q}}{}^\dagger(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')]=&(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}})A_{\boldsymbol{q}}{}^\dagger(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')\\ &+\sum_{\boldsymbol{q}_1}V(\boldsymbol{q}_1)\sum_{\boldsymbol{k}_1,\sigma_1}a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}_1,\sigma}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{q}_1,\sigma_1}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}_1\sigma_1}a_{\boldsymbol{k}\sigma'}\\ &-\sum_{\boldsymbol{q}_1}V(\boldsymbol{q}_1)\sum_{\boldsymbol{k}_1,\sigma_1}a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{q}_1,\sigma_1}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}_1\sigma_1}a_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}_1,\sigma'}\end{aligned} \tag{11}$$

と計算される。(11)の右辺には $a^\dagger$, a について4次の項があり，このままでは(4)の形にはならないので，近似として4次の項の中で(10)の $A_{\boldsymbol{q}}{}^\dagger(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')$ と $n_{\boldsymbol{k}\sigma}=a_{\boldsymbol{k}\sigma}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}\sigma}$ の積になっているものだけをとることにする。たとえば

第二項では

$$a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}_1,\sigma}{}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{q}_1,\sigma_1}{}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}_1\sigma_1}a_{\boldsymbol{k}\sigma'} \longrightarrow \delta_{\boldsymbol{q}_1}n_{\boldsymbol{k}_1\sigma_1}A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')+\delta_{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}_1}\delta_{\sigma\sigma'}n_{\boldsymbol{k}\sigma}A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k}_1,\sigma_1\sigma_1)$$
$$-\delta_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}_1}\delta_{\sigma\sigma_1}n_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}_1,\sigma}A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')$$
$$-\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{q}_1}\delta_{\sigma_1\sigma'}n_{\boldsymbol{k}\sigma'}A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}_1,\sigma\sigma') \qquad (12)$$

と近似してしまう。第三項についても同じ近似をすると，(11)は

$$[H,\ A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')]\simeq(\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}-\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}\sigma'})A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')$$
$$-(n_{\boldsymbol{k}\sigma'}-n_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma})\sum_{\boldsymbol{k}'}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\{A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k}',\sigma\sigma')+A_{-\boldsymbol{q}}(-\boldsymbol{k}',\sigma\sigma')\}$$
$$+V(\boldsymbol{q})\delta_{\sigma\sigma'}(n_{\boldsymbol{k}\sigma'}-n_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma})\sum_{\boldsymbol{k}'\sigma_1}\{A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k}',\sigma_1\sigma_1)+A_{-\boldsymbol{q}}(-\boldsymbol{k}',\sigma_1\sigma_1)\}$$
$$(13)$$

となる。ただし $A_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')$ は(10)の Hermite 共役演算子である。ここで

$$A_{-\boldsymbol{q}}(-\boldsymbol{k},\sigma'\sigma)=a_{-\boldsymbol{k}\sigma}{}^{\dagger}a_{-\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q},\sigma'} \qquad (|\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}},\quad |\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|>k_{\mathrm{F}})$$

は (10) と同じ形をしているが，$|\boldsymbol{k}|$, $|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|$ についての条件のため，相互作用のないときの基底状態に演算すると 0 になるものである。また $\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}$ は

$$\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}\sigma}=\epsilon_{\boldsymbol{k}}+V(0)N-\sum_{\boldsymbol{k}'}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')n_{\boldsymbol{k}'\sigma} \qquad (14)$$

で定義されるエネルギーであるが，これが実は Hartree-Fock 近似における励起エネルギーであることは，(4·20 b)の［　］内と一致することから明らかであろう*。さらに (13) の右辺の $n_{\boldsymbol{k}\sigma}$ を相互作用のないときの基底状態での期待値でおきかえることにすると，$A^{\dagger}$ の定義より $n_{\boldsymbol{k}\sigma}=1$, $n_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}=0$ であるから

$$[H,\ A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')]\simeq(\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}})A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')$$
$$-\sum_{\boldsymbol{k}'}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\{A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k}',\sigma\sigma')+A_{-\boldsymbol{q}}(-\boldsymbol{k}',\sigma'\sigma)\}$$
$$+V(\boldsymbol{q})\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\boldsymbol{k}'\sigma_1}\{A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k}',\sigma_1\sigma_1)+A_{-\boldsymbol{q}}(-\boldsymbol{k}',\sigma_1\sigma_1)\} \quad (15)$$

となる。

上の近似は，**乱雑位相近似** (random phase approximation, 略して RPA) といわれているが，その意味は次の通りである。RPA の本質は(12)であるが，これの左辺は元来 $A_{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k})A_{-\boldsymbol{q}_1}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k}_1)$ のように二つの $A_{\boldsymbol{q}}{}^{\dagger}$ または $A_{\boldsymbol{q}}$ の積の形になっている。この形のものを $\boldsymbol{k}$ および $\boldsymbol{k}_1$ で和をとると

$$\sum_{\boldsymbol{k}}\{A_{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}_1}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k})+A_{-\boldsymbol{q}-\boldsymbol{q}_1}(-\boldsymbol{k})\}\sum_{\boldsymbol{k}_1}\{A_{-\boldsymbol{q}_1}{}^{\dagger}(\boldsymbol{k}_1)+A_{\boldsymbol{q}_1}(-\boldsymbol{k}_1)\}$$

---

*　相互作用が Coulomb 力の場合は，(14)の第二項 $V(0)N$ はなく，交換相互作用だけが残る。

という形になるが，これの各因子は，ふつうの表示にすれば

$$\sum_j e^{i(\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}_1)\cdot\boldsymbol{r}_j}\sum_{j'} e^{-i\boldsymbol{q}_1\cdot\boldsymbol{r}_{j'}}$$

という形をしている。この形のものから $\boldsymbol{q}_1=0$ または $\boldsymbol{q}_1=-\boldsymbol{q}$ の項だけをとるのが RPA であるが，それは

$$\sum_j e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_j}N$$

という形である。つまり元の形は $\sum_j \exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_j)$ という因子が2個あるのに対し，RPA では1個になるものだけをとっている。この因子は各粒子の位置によって位相が異なり，粒子の位置がでたらめのときはいろいろな位相をもった項の和になっているので，きわめて小さいものになる。このようにでたらめな位相をもった項の和を無視し，位相のそろった項だけをとるので，乱雑位相近似とよばれる*。

基準座標　(15)の右辺は $A^\dagger$, A の1次式なので，(4)を満たす $A_\alpha^\dagger$ を次の形に選ぶ。

$$A_\alpha^\dagger=\sum_{\boldsymbol{k},\sigma\sigma'}\{u_\alpha(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')A_{\boldsymbol{q}}^\dagger(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')+v_\alpha(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')A_{-\boldsymbol{q}}(-\boldsymbol{k},\sigma'\sigma)\} \tag{16}$$

そして

$$[H,\ A_\alpha^\dagger]=\epsilon_\alpha A_\alpha^\dagger \tag{16'}$$

になるように u, v をきめればよい。(16′) に (16) を代入して両辺の $A_{\boldsymbol{q}}^\dagger$, $A_{-\boldsymbol{q}}$ の係数を等しいとおけば，u, v をきめる方程式が得られる。それは

$$\{\epsilon_\alpha-\varpi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})\}u_\alpha(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')=-\sum_{\boldsymbol{k}'}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\{u_\alpha(\boldsymbol{k}',\sigma\sigma')-v_\alpha(\boldsymbol{k}',\sigma\sigma')\}$$
$$+V(\boldsymbol{q})\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\boldsymbol{k}',\sigma_1}\{u_\alpha(\boldsymbol{k}',\sigma_1\sigma_1)-v_\alpha(\boldsymbol{k}',\sigma_1\sigma_1)\} \tag{17 a}$$

$$\{\epsilon_\alpha+\varpi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})\}v_\alpha(\boldsymbol{k},\sigma\sigma')=-\sum_{\boldsymbol{k}'}V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\{u_\alpha(\boldsymbol{k}',\sigma\sigma')-v_\alpha(\boldsymbol{k}',\sigma\sigma')\}$$
$$+V(\boldsymbol{q})\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\boldsymbol{k}',\sigma_1}\{u_\alpha(\boldsymbol{k}',\sigma_1\sigma_1)-v_\alpha(\boldsymbol{k}',\sigma_1\sigma_1)\} \tag{17 b}$$

となることがわかる。ただし

$$\varpi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})=\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}} \tag{18}$$

とおいた。

(17)式の解　(17 a, b)は一般的には解けない。そこで以下では相互作用が Coulomb 力の場合と，短距離力の場合に分けて，近似的に解くことを考える。

---

* この近似は違う形ではあるが，D. Bohm and D. Pines: Phys. Rev. **92**, 609 (1953) によって導入されたものである。

i) Coulomb 相互作用の場合 前にも述べたように Coulomb 相互作用はきわめて長距離まで働くことに特徴があり，その Fourier 成分は

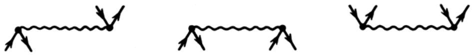
$$V(\boldsymbol{q})=\frac{4\pi e^2}{\Omega q^2} \tag{19}$$

という形で，q が小さいとき非常に大きくなる*。したがって(17 a, b)の右辺では，第二項の方が重要と考えられ，第一項は無視することにする。また(18)の $\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}$ の中の相互作用からくる部分は小さいものとして無視し，

$$\omega_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})=\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}} \tag{18'}$$

でおきかえる。

この近似は，7-3 で述べたリング近似と同じであることがすぐにわかる。$A_{\boldsymbol{q}}^\dagger(\boldsymbol{k})$, $A_{-\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})$ はどちらも運動量を $\hbar\boldsymbol{q}$ だけ増加させる演算子であるが，(17)の右辺第二項だけをとることは，同じ運動量 $\hbar\boldsymbol{q}$ を運ぶ相互作用だけをとることである。グラフでかけば 9·1 図のような相互作用をとるこ



9·1 図

とになり，これをくり返せばリング型の図形の和になる。この近似を使うと，u, v とも $\sigma=\sigma'$ のときにのみ残り，また σ にはよらないことがすぐにわかる。そこで

$$u_\alpha(\boldsymbol{k},\sigma\sigma)=u_\alpha(\boldsymbol{k}),\quad v_\alpha(\boldsymbol{k},\sigma\sigma)=v_\alpha(\boldsymbol{k})$$

と書くと，(17 a, b)より

$$u_\alpha(\boldsymbol{k})=\frac{1}{\epsilon_\alpha-\omega_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})}2V(\boldsymbol{q})\sum_{\boldsymbol{k}'}\{u_\alpha(\boldsymbol{k}')-v_\alpha(\boldsymbol{k}')\} \tag{20 a}$$

$$v_\alpha(\boldsymbol{k})=\frac{1}{\epsilon_\alpha+\omega_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})}2V(\boldsymbol{q})\sum_{\boldsymbol{k}'}\{u_\alpha(\boldsymbol{k}')-v_\alpha(\boldsymbol{k}')\} \tag{20 b}$$

となる。ただし $\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}'$ については，常に (10′) という条件がついていることを注意しておく。

(20 a)から(20 b)を引いて $\boldsymbol{k}$ について和をとると

$$\left[1-2V(\boldsymbol{q})\sum_{\boldsymbol{k}}{}'\left\{\frac{1}{\epsilon_\alpha-\omega_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})}-\frac{1}{\epsilon_\alpha+\omega_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})}\right\}\right]\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'\{u_\alpha(\boldsymbol{k}')-v_\alpha(\boldsymbol{k}')\}=0$$

という式が得られ**，u, v がすべて 0 でないかぎり，[ ] 内が 0 になら

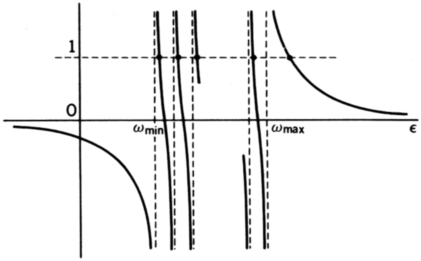
* ただし $\boldsymbol{q}=0$ の成分は，一様な正電荷の存在によって打ち消されるので，ハミルトニアンには現われない。(7·47)式を参照。

** $\boldsymbol{k}$ についての和に ′ がついているのは，$|\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}$, $|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|>k_{\mathrm{F}}$ を満たす $\boldsymbol{k}$ についての和であることを意味する。

なければならない。つまり

$$\frac{8\pi e^2}{\Omega q^2}\sum_{\boldsymbol{k}}{}' \left\{\frac{1}{\epsilon_\alpha-\omega_q(\boldsymbol{k})}-\frac{1}{\epsilon_\alpha+\omega_q(\boldsymbol{k})}\right\}=1 \tag{21}$$

を満たす ϵ_α が励起エネルギーということになる。(21) の左辺を正の ϵ_α について図にかくと，9·2 図のようになる。$\omega_q(\boldsymbol{k})$ は $\boldsymbol{k}$ によってある $\omega_{\min}$ から $\omega_{\max}$ までの間に分布し，系全体が1辺 L の立方体内に入っているとすれば，各準位の



9·2 図

間隔は $1/L^2$ の程度で非常に小さい。(21) の左辺は，ϵ_α がこれらの準位のエネルギーに等しい所では発散する。そして $\epsilon_\alpha\to\infty$ では0になり，この変化を定性的に示したのが 9·2 図である。この図の曲線と高さ1の直線との交点が，(21) の解になるが，図からわかるように各準位の間に解が一つずつあり，さらに $\omega_{\max}$ より高い所に一つの根がある。

$\omega_{\min}$ と $\omega_{\max}$ の間にある解については，ϵ_α はある $\omega_q(\boldsymbol{k}_0)$ に最も近いので，(20 a, b) からわかるように，$u_\alpha(\boldsymbol{k})$ は $\boldsymbol{k}\simeq\boldsymbol{k}_0$ で鋭い極大を示し，$v_\alpha(\boldsymbol{k})$ は $u_\alpha(\boldsymbol{k})$ に比べると小さい。したがってこれに対応する励起状態は，ほぼ $A_q{}^\dagger(\boldsymbol{k}_0)|0\rangle$ で表わされるといってよい*。これに対し $\omega_{\max}$ より高い所にある解は，$u_\alpha(\boldsymbol{k})$, $v_\alpha(\boldsymbol{k})$ は特別な $\boldsymbol{k}_0$ で極大を示すようなことはなく，比較的ゆっくり変化している。つまりあらゆる $\boldsymbol{k}$ の $A_q{}^\dagger(\boldsymbol{k})|0\rangle$ が同じように寄与している。これが 9-1 で述べた集団的な励起状態であり，この場合これに対応する振動を**プラズマ振動** (plasma oscilation) とよび，これを量子化したときの粒子を**プラズモン** (plasmon) とよんでいる。

物理学におけるプラズマとは，正に帯電したイオンと負電荷をもった電子とが分かれて，互いに Coulomb 力を及ぼし合いながら熱運動をしている状態を意味するもので，いま考えている系も正電荷の一様な海の中で電子が運動をしており，この意味でプラズマ状態にあるといってもよい。プラズマ振動は粒子の統計によらず，

---

* この状態は，Fermi 球の内部 $\boldsymbol{k}$ の粒子が $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$ に移った状態であるが，相互作用があると $(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})\to(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q})$ というように状態が変わる。粒子と孔が $(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})$ で入射して相互作用によって散乱されるといってもよいので，**散乱状態**ということもある。

たとえば Bose 粒子系でも，古典粒子系でも，相互作用が Coulomb 力の場合にはいつも現われるものである。

プラズマ振動数 プラズマ振動のエネルギーを近似的に求めるには，(21)で $\epsilon_\alpha \gg \omega_q(\boldsymbol{k})$ として，ϵ_α の逆数で展開すればよい。すなわち

$$\frac{8\pi e^2}{\Omega q^2}\sum_{\boldsymbol{k}}{}' 2\left(\frac{\omega_q(\boldsymbol{k})}{\epsilon_\alpha}+\frac{\omega_q{}^3(\boldsymbol{k})}{\epsilon_\alpha{}^3}+\cdots\right)=\epsilon_\alpha \tag{22}$$

とし，まず第一項だけをとる。(18′)を参照し

$$\sum_{\substack{|\boldsymbol{k}|<k_F\\|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|<k_F}}\omega_q(\boldsymbol{k})=\sum_{\substack{|\boldsymbol{k}|<k_F\\|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|<k_F}}(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}})=0$$

を用いれば

$$\sum_{\substack{|\boldsymbol{k}|<k_F\\|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|>k_F}}\omega_q(\boldsymbol{k})=\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_F}\omega_q(\boldsymbol{k})=\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_F}(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}})$$

$$=\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_F}\frac{\hbar^2}{2m}\{(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q})+q^2\}$$

$$=\frac{\hbar^2q^2}{2m}\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_F}1=\frac{\hbar^2q^2}{2m}\frac{N}{2} \qquad (N\text{ は全電子数})$$

となるから，

$$\frac{8\pi e^2}{q^2}\frac{N}{\Omega}2\frac{\hbar^2q^2}{2m}\frac{1}{2}=\epsilon_\alpha{}^2$$

または振動数を $\omega_0(\epsilon_\alpha=\hbar\omega_0)$ とすれば

$$\omega_0=\left[\frac{4\pi Ne^2}{m\Omega}\right]^{1/2} \tag{23}$$

が得られる。これは波数 $\boldsymbol{q}$ によらず一定であるが，(22)の第二項以下を考慮に入れれば，$\boldsymbol{q}$ によって変化する部分が現われる。

(23)のプラズマ振動の振動数は，いまのような Fermi 統計に限らず，古典統計でも Bose 統計でも同じ式が得られる。その一例は，4-6 で述べた Bose 粒子系における Bogoljubov 変換の方法で得られたフォノンのエネルギー (4·82) である。つまり

$$E_{\boldsymbol{q}}=\{\epsilon_{\boldsymbol{q}}(\epsilon_{\boldsymbol{q}}+2NV_{\boldsymbol{q}})\}^{1/2}$$

であるが，$\epsilon_{\boldsymbol{q}}=\hbar^2q^2/2m$，$V_{\boldsymbol{q}}=4\pi e^2/\Omega q^2$ を代入し，q が小さいとして $\epsilon_{\boldsymbol{q}}+NV_{\boldsymbol{q}}\sim NV_{\boldsymbol{q}}$ とおいてしまうと

$$E_{\boldsymbol{q}}=\left(\frac{\hbar^2q^2}{2m}2N\frac{4\pi e^2}{\Omega q^2}\right)^{1/2}=\hbar\left(\frac{4\pi Ne^2}{m\Omega}\right)^{1/2}$$

となり，(23)に一致する。

これはまたもっと古典的なモデルに基づいても導出できる。正電荷の一様な海の

中にある電子を考え，全電子が一様に δx だけずれたとする。すると系の内部は電気的に中性が保たれているが，表面ではそれぞれ $\pm e\delta x\cdot(N/V)$ の表面電荷が生ずる。この表面電荷によって内部に電場 E ができ，それは

$$E=+4\pi e\delta x\frac{N}{\Omega}$$

で与えられる。したがって一つの電子の運動方程式は

$$m\frac{d^2(\delta x)}{dt^2}=-eE=-4\pi e^2\delta x\frac{N}{\Omega}$$

となり，電子は(23)で与えられるプラズマ振動数で振動することが示される。

ii) 短距離相互作用の場合　この場合は，$V(\boldsymbol{q})$ はすべての $\boldsymbol{q}$ に対してとくに大きくなるということはない。したがって(17 a, b)の右辺の二つの項はどちらも同じ程度の大きさをもち，前のように一方だけをとる近似は使えなくなり，解くのがむずかしくなる。まずスピンの向きについて整理しておく。(17 a, b)で $\sigma=\sigma'$ と $\sigma\neq\sigma'$（これを $\sigma'=-\sigma$ と書く）とに分けて書くことにする。$\sigma=\sigma'$ のときは，$u_\alpha(\boldsymbol{k},\uparrow\uparrow)=u_\alpha(\boldsymbol{k},\downarrow\downarrow)$ という解と，$u_\alpha(\boldsymbol{k},\uparrow\uparrow)=-u_\alpha(\boldsymbol{k},\downarrow\downarrow)$ という二つの解があることがわかる。前者を $u_\alpha{}^{\mathrm{s}}$，後者を $u_\alpha{}^{\mathrm{t}}$ と書けば*

$$\left.\begin{aligned}\{\epsilon_\alpha-\varpi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})\}u_\alpha{}^{\mathrm{s}}(\boldsymbol{k})&=-\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'\{V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')-2V(\boldsymbol{q})\}\{u_\alpha{}^{\mathrm{s}}(\boldsymbol{k}')-v_\alpha{}^{\mathrm{s}}(\boldsymbol{k}')\}\\\{\epsilon_\alpha+\varpi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})\}v_\alpha{}^{\mathrm{s}}(\boldsymbol{k})&=-\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'\{V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')-2V(\boldsymbol{q})\}\{u_\alpha{}^{\mathrm{s}}(\boldsymbol{k}')-v_\alpha{}^{\mathrm{s}}(\boldsymbol{k}')\}\end{aligned}\right\}\tag{24}$$

および

$$\left.\begin{aligned}\{\epsilon_\alpha-\varpi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})\}u_\alpha{}^{\mathrm{t}}(\boldsymbol{k})&=-\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\{u_\alpha{}^{\mathrm{t}}(\boldsymbol{k}')-v_\alpha{}^{\mathrm{t}}(\boldsymbol{k}')\}\\\{\epsilon_\alpha+\varpi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})\}v_\alpha{}^{\mathrm{t}}(\boldsymbol{k})&=-\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'V(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\{u_\alpha{}^{\mathrm{t}}(\boldsymbol{k}')-v_\alpha{}^{\mathrm{t}}(\boldsymbol{k}')\}\end{aligned}\right\}\tag{25}$$

となる。一方 $\sigma'=-\sigma$ に対しては，方程式は (25) と同じであり，(25) を満たす解には独立なものが 3 個存在することになる。つまりスピンについて 3 重項(triplet)になっている。一方(24)を満たす解は 1 個だけで 1 重項(singlet)である。

(24)式の解　(24), (25)はこのままでは解けないので，相互作用として，ふつうの空間では δ 関数型のもの，つまり

$$V(\boldsymbol{r})=V_0\delta(\boldsymbol{r})$$

として，$V(\boldsymbol{q})\sim V(0)$ とおいてしまう。すると(24)は

$$u_\alpha{}^{\mathrm{s}}(\boldsymbol{k})=\frac{V(0)}{\epsilon_\alpha-\varpi_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})}\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'\{u_\alpha{}^{\mathrm{s}}(\boldsymbol{k}')-v_\alpha{}^{\mathrm{s}}(\boldsymbol{k}')\}$$

---

* $u^{\mathrm{s}}=u(\uparrow\uparrow)+u(\downarrow\downarrow)$，$u^{\mathrm{t}}=u(\uparrow\uparrow)-u(\downarrow\downarrow)$ とおくことと同じである。

$$v_\alpha{}^s(\boldsymbol{k})=\frac{V(0)}{\epsilon_\alpha+\varpi_q(\boldsymbol{k})}\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'\{u_\alpha{}^s(\boldsymbol{k}')-v_\alpha{}^s(\boldsymbol{k}')\}$$

となる。上の二つの式の差をつくって $\boldsymbol{k}$ について和をとれば，ϵ_α をきめる式として

$$1=V(0)\sum_{\boldsymbol{k}}{}'\left\{\frac{1}{\epsilon_\alpha-\varpi_q(\boldsymbol{k})}-\frac{1}{\epsilon_\alpha+\varpi_q(\boldsymbol{k})}\right\}$$

が得られる。ここで $\boldsymbol{k}$ の和は $|\boldsymbol{k}|<k_{\rm F}$, $|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|>k_{\rm F}$ の範囲であるが，これは Fermi 分布の粒子数 $n_{\boldsymbol{k}}$ を使って

$$1=V(0)\sum_{\boldsymbol{k}}\left(\frac{1}{\epsilon_\alpha-\varpi_q(\boldsymbol{k})}-\frac{1}{\epsilon_\alpha+\varpi_q(\boldsymbol{k})}\right)n_{\boldsymbol{k}}(1-n_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}) \tag{26}$$

と表わせる。(26) の第二項で $\boldsymbol{k}\to-\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}$, $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}\to-\boldsymbol{k}$ という変換をすれば，$\varpi_q(\boldsymbol{k})=\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}\to-\varpi_q(\boldsymbol{k})$ になるので

$$1=V(0)\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{n_{\boldsymbol{k}}-n_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}}{\epsilon_\alpha-\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}+\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}} \tag{27}$$

と変形される。(27)の解は，i) の場合と同じように，$\epsilon_\alpha\simeq\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}$ に散乱状態の励起があり (個別励起*)，また i) のプラズマ振動と同じような集団励起も存在する。

集団励起のエネルギー 集団励起のエネルギー ϵ_0 を $|\boldsymbol{q}|$ の小さいときに近似的に解く。まず

$$\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}=\frac{\hbar^2}{2m^*}k^2 \tag{28}$$

と近似する**。すると q の小さいときは

$$\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}=\frac{\hbar^2}{m^*}\left(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q}+\frac{1}{2}q^2\right)\sim\frac{\hbar^2}{m^*}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q} \tag{29}$$

とすることができ，また $n_{\boldsymbol{k}}$ は(28)の $\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}$ を用いて

$$n_{\boldsymbol{k}}=\theta(\mu-\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}) \tag{30}$$

と書けるので

$$n_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-n_{\boldsymbol{k}}\simeq\boldsymbol{q}\cdot\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}n_{\boldsymbol{k}}=\boldsymbol{q}\cdot\frac{\partial\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}}{\partial\boldsymbol{k}}\frac{dn}{d\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}}=\frac{\hbar^2}{m^*}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{k})\{-\delta(\tilde{\epsilon}_{\boldsymbol{k}}-\mu)\} \tag{31}$$

と近似できる。(30), (31)を(27)に代入し，$\boldsymbol{k}$ についての和を積分に直すと

$$\begin{aligned}1&=\Omega V(0)\frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^\infty 2\pi k^2dk\int_{-1}^1 d(\cos\theta)\frac{(\hbar^2/m^*)qk\cos\theta}{\epsilon_0-(\hbar^2/m^*)qk\cos\theta}\delta\left(\frac{\hbar^2}{2m^*}k^2-\mu\right)\\&=\Omega V(0)\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{m^*k_{\rm F}}{\hbar^2}\int_{-1}^1 t\left(\frac{m^*\epsilon_0}{\hbar^2qk_{\rm F}}-t\right)^{-1}dt\end{aligned} \tag{32}$$

---

* 個別励起のエネルギーは，一つの粒子がある $\boldsymbol{k}$ から他の $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}$ へ励起したときのエネルギーの差の形で書き表わされている。このような粒子は，相互作用のない場合の粒子とは違っているので，区別して**準粒子**(quasi particle)とよぶ。

** これを有効質量近似とよび，m^* を**有効質量**(effective mass)という。

となる。ただし

$$\frac{\hbar^2}{2m^*}k_F{}^2=\mu$$

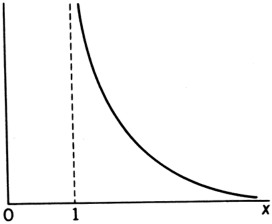
とおいた。(32)で

$$x=\frac{m^*\epsilon_0}{\hbar^2 k_F q}=\frac{\varepsilon_0}{\hbar v_F q} \tag{33}$$

とおけば*

$$1=\Omega V(0)\frac{2m^*k_F}{(2\pi\hbar)^2}\left(\frac{x}{2}\log\frac{x+1}{x-1}-1\right) \tag{34}$$

と計算できる。これの（ ）内の関数は $|x|>1$ でのみ定義されており，$x\to\infty$ では 0 になり，$x\to 1+$ で ∞ になる。その定性的なふるまいは 9·3 図のようになる。したがって(34)の解は



9·3 図　関数 $\frac{x}{2}\log\frac{x+1}{x-1}-1$ のふるまい

$$\begin{aligned} &x\sim 1 && \left(\Omega V(0)\frac{m^*k_F}{(2\pi\hbar)^2}\ll 1 \text{ のとき}\right) \\ &x^2\sim\frac{2}{3}\Omega V(0)\frac{m^*k_F}{(2\pi\hbar)^2} && \left(\Omega V(0)\frac{m^*k_F}{(2\pi\hbar)^2}\gg 1 \text{ のとき}\right) \end{aligned} \tag{35}$$

で与えられる。こうして ϵ_0 は q に比例し，これは振動数を ω_0 とすれば

$$\omega_0=xv_Fq \tag{36}$$

で与えられることになる。

ゼロ音波　これに対応する $A_\alpha{}^\dagger$ は $A_q{}^\dagger(\boldsymbol{k})$ と $A_{-q}(-\boldsymbol{k})$ を同じような割合で含んでおり，実は密度

$$\rho_q=\sum_{k,\sigma}a_{k+q,\sigma}{}^\dagger a_{k,\sigma}$$

の振動に対応している**。密度の振動は音波にほかならないが，ここの音波はふつうの意味での音波と次の点で異なっている。ふつうの音波は，粒子の密度がある場所で平衡値からずれるとき，粒子間の衝突によってまず局所的な熱平衡の状態になり，この場所的に異なった熱平衡の状態が波となって伝播するものである。これに対しここで考えている音波は，局所的な熱平衡状態にはならず，周囲の粒子との直接的な相互作用によって密度の変化が伝播してゆく。このような密度の波を**ゼロ音波**(zero sound)とよび，これに対しふつうの音波を**第1音波**(first sound)とよぶ。

(25)式の解　以上は(24)の1重項についての解であったが，次に(25)の3重項について同じ近似で考える。$V(\boldsymbol{q})$ をすべて $V(0)$ でおきかえれば，3重項と1重項との差は，たとえば(26)の右辺に負号がつくだけであることがわかる。すると以下の議論は符号を変えるだけでそのまま使え，結局

* $\hbar k_F/m^*=v_F$ は Fermi 面上における粒子の速度である。
** このことは i) の場合のプラズマ振動でも同じことである。

(34)の右辺に負号がつくだけになる。ところが，右辺(　)内の関数はxについて偶関数で，$|x|>1$ で常に正である。したがって $V(0)>0$ であるかぎり3重項に対しては集団励起は存在しない。$V(0)<0$ のときは系は超伝導になるので，いまのような近似は使えないので，いずれにせよ3重項に対しては集団励起は存在せず，個別励起のみということになる。

9-3 Heisenberg 強磁性体

1-5, (d)で述べた Heisenberg モデルでは，強磁性体の基底状態と最初の励起状態(スピン波が1個存在する状態)は正確に求めることができる。しかしそれ以上の励起状態，スピン波が2個以上存在する状態は，スピン波間に相互作用があるため，正確には求めることはむずかしい。したがって有限温度における性質を調べるためには，この相互作用を適当に処理しなければならない。Fermi 粒子や Bose 粒子の場合には Feynmann グラフを用いることができるが，スピン演算子に対しては Wick の定理は成立しないため，Feynmann グラフのような系統的な解析はできない。そこでまず考えられることは，スピン演算子を適当な Bose または Fermi 演算子でおきかえることであり，実際にもいくつかの試みがなされている。以下ではその中の代表的なものについて説明する。

Holstein-Primakoff の方法　一つのスピンに対する演算子 S^z, $S^+=S^x+iS^y$, $S^-=S^x-iS^y$ を考える。いまこのスピンの大きさを S とし，S^z の固有値 m に対する固有関数を $|m\rangle$ とする。つまり

$$S^z|m\rangle=m|m\rangle \tag{37}$$

とすると，(1·84)で示したように

$$\begin{aligned}S^+|m\rangle&=\sqrt{S(S+1)-m(m+1)}\,|m+1\rangle\\ S^-|m\rangle&=\sqrt{S(S+1)-m(m-1)}\,|m-1\rangle\end{aligned} \tag{38}$$

である。ここで

$$\hat{n}=S-S^z \tag{39}$$

という演算子を定義すると

$$\hat{n}|m\rangle=(S-m)|m\rangle$$

なので，$\hat{n}$ の固有値 $S-m$ を改めて n と書くと

$$\hat{n}|S-n\rangle=n|S-n\rangle$$

である。すると(38)は

$$
\left.\begin{aligned}
S^+|S-n\rangle&=\sqrt{n(2S-n+1)}\,|S-(n-1)\rangle\\
S^-|S-n\rangle&=\sqrt{(n+1)(2S-n)}\,|S-(n+1)\rangle
\end{aligned}\right\}\qquad(40)
$$

となる。この n はスピンの z 成分がその最大値 S からどのくらいずれているかを表わしており，**スピンのずれ**(spin deviation) とよばれている。ここで $\hat{n}$ を Bose 演算子 $a^\dagger$, a を用いて

$$
\hat{n}=a^\dagger a,\quad [a,\ a^\dagger]=1 \qquad (41)
$$

と書くと，(40)は

$$
S^+=\sqrt{2S}\sqrt{1-\frac{\hat{n}}{2S}}\,a \qquad (42\,\mathrm{a})
$$

$$
S^-=\sqrt{2S}\,a^\dagger\sqrt{1-\frac{\hat{n}}{2S}} \qquad (42\,\mathrm{b})
$$

と書ける。

ここで注意しなければならないことは，(39) の $\hat{n}$ の固有値 n は，0, 1, 2, …, $2S$ までの値しかとれないのに対し，(41) の $\hat{n}$ の固有値は 0, 1, 2, … といくらでも大きいものが存在することである。つまり(41)と書くことは，考えている空間を本来のものより広げて考えることになる。すなわち (41) の空間は物理的な空間 $n=0, 1, 2, \cdots, 2S$ と，物理的に意味のない空間 $n=2S+1, 2S+2, \cdots$ の両方が含まれている。しかし実際にすべての物理量はスピン演算子で書かれており，(42 b)からわかるように $n=2S$ の状態に S^- を演算すると 0 になるから，上の物理的空間を非物理的空間に結びつける行列要素はない。物理的空間を議論している限り，(42 a, b)の形のままならば，非物理的空間は議論に入ってこないはずである。

(39), (42 a, b)を Heisenberg モデルのハミルトニアン

$$
H=-2J\sum_{(i,j)}\left\{S_i^zS_j^z+\frac{1}{2}(S_i^+S_j^-+S_i^-S_j^+)\right\} \qquad (43)
$$

に代入すれば，

$$
\begin{aligned}
H=&-JS^2Nz+4JSz\sum_i a_i^\dagger a_i\\
&-2JS\sum_{(i,j)}\left(a_i^\dagger\sqrt{1-\frac{a_i^\dagger a_i}{2S}}\sqrt{1-\frac{a_j^\dagger a_j}{2S}}\,a_j+a_j^\dagger\sqrt{1-\frac{a_j^\dagger a_j}{2S}}\sqrt{1-\frac{a_i^\dagger a_i}{2S}}\,a_i\right)\\
&-2J\sum_{(i,j)}a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j
\end{aligned} \qquad (44)
$$

となる。独立なスピン波のハミルトニアンは，(44) の中から $a^\dagger$, a について 2 次の項だけをとったものである。つまり

$$H_0=-JS^2Nz+4JSz\sum_i a_i{}^\dagger a_i-2JS\sum_{(i,j)}(a_i{}^\dagger a_j+a_j{}^\dagger a_i) \tag{45}$$

とし，$a_i{}^\dagger$, a_i を Fourier 変換して

$$a_i=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\boldsymbol{k}} {}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_i}a_{\boldsymbol{k}} \tag{46}$$

と書けば

$$H_0=-NzJS^2+\sum_{\boldsymbol{k}}2zJS(1-\gamma_{\boldsymbol{k}})a_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}} \tag{47}$$

と対角化され，$a_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger$, $a_{\boldsymbol{k}}$ は波数 $\boldsymbol{k}$ のスピン波の生成，消滅演算子になっている。なお(47)の $\gamma_{\boldsymbol{k}}$ は(8·70)で定義した量であり，$a_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}}$ の係数は(1·92)の $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ になっている。

さてスピン波間の相互作用は，(44)から(45)の H_0 を差し引いた残りで

$$\begin{aligned}H_1=H-H_0=2JS\sum_{(i,j)}&\left\{a_i{}^\dagger\left(1-\sqrt{1-\frac{a_i{}^\dagger a_i}{2S}}\sqrt{1-\frac{a_j{}^\dagger a_j}{2S}}\right)a_j\right.\\&\left.+a_j{}^\dagger\left(1-\sqrt{1-\frac{a_j{}^\dagger a_j}{2S}}\sqrt{1-\frac{a_i{}^\dagger a_i}{2S}}\right)a_i\right\}-2J\sum_{(i,j)}a_i{}^\dagger a_i a_j{}^\dagger a_j\end{aligned} \tag{48}$$

で与えられる。H_1 の影響を実際に計算するには，(48)を $a_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger$, $a_{\boldsymbol{k}}$ で表わしてからその行列要素を求めなければならないが，平方根を含む項はこのままでは不可能である。そこで平方根を展開して

$$\sqrt{1-\frac{n_i}{2S}}=1-\frac{n_i}{4S}-\frac{n_i{}^2}{32S^2}-\cdots$$

としなければならない。すると H_1 は無限に多くの項を含み，取り扱いに不便が生ずる。

以上の方法を **Holstein**(ホルシュタイン)**-Primakoff**(プリマコフ) **の変換***とよんでいるが，上に述べたように平方根を含むのでやや不便である。これを改良したのが次の Dyson(ダイソン)**の方法である。

Dyson の方法 Dyson はやはりスピン演算子を Bose 演算子でおきかえることを考えたが，それは次のようなものであった。強磁性体の基底状態 $|0\rangle$ として，全部のスピンが z 方向を向いている状態(1·86)をとる。これは(1·87)のように

$$S_i{}^+|0\rangle=0 \tag{49}$$

という性質をもっている。したがって励起状態としては

---

* T. Holstein and H. Primakoff: Phys. Rev. **58**, 1098 (1940).

** F. J. Dyson: Phys. Rev. **102**, 1217, 1230 (1956).

$$|\{n_i\}\rangle=\prod_i\frac{1}{(n_i!)^{1/2}}\frac{(S_i^-)^{n_i}}{(2S)^{n_i/2}}|0\rangle \qquad (n_i=0,\ 1,\ 2,\ \cdots,\ 2S) \tag{50}$$

という形の状態の1次結合で書き表わされることになる。ところが(50)の状態は互いに独立ではあるが，これらの状態の間の行列要素の計算はきわめて面倒である。そこで(50)の状態に対応して，Bose 演算子 $a_i^\dagger$, a_i を使って

$$|\{n_i\})=\prod_i\frac{(a_i^\dagger)^{n_i}}{(n_i!)^{1/2}}|0) \tag{51}$$

を考える。そしてこの Bose 粒子の空間でのハミルトニアン $\mathscr{H}$ を次のようにつくる。(43)のスピン系のハミルトニアンを H とし，(50)のいろいろな状態を $|\alpha\rangle$，対応する(51)の状態を $|\alpha)$ と書く。そして

$$H|\alpha\rangle=\sum_\beta H_{\beta\alpha}|\beta\rangle \tag{52}$$

と展開したとすると，$|\alpha\rangle$ は独立であるから $H_{\alpha\beta}$ は完全にきめることができる。この $H_{\beta\alpha}$ を用いて，Bose 粒子の空間でも

$$\mathscr{H}|\alpha)=\sum_\beta H_{\beta\alpha}|\beta) \tag{52'}$$

となるように $\mathscr{H}$ をつくる。するとスピン系の性質は，この $\mathscr{H}$ をもった Bose 粒子系の性質と全く同じになるはずである。ただし(51)の n_i は上限がないので，$n_i>2S$ である空間は，スピン系にはなく，この非物理的な空間からの寄与は何らかの方法でなくさねばならない。これはハミルトニアンでは表わせない相互作用なので，**kinematical interaction** とよび，ハミルトニアン中に現われる相互作用を **dynamical interaction** とよぶ*。この二つの相互作用は，ハミルトニアンのとり方によって異なることもあるので，余りはっきりした分け方ではないが，一応こうよんでおくことにする。

ハミルトニアンのつくり方　さていまの場合(52)の $H_{\beta\alpha}$ を求めるには次のようにする。まず二つの演算子 A, B に対して，(52)と同様に $A_{\alpha\beta}$, $B_{\alpha\beta}$ を定義したとすれば

$$(AB)_{\alpha\beta}=\sum_\gamma A_{\alpha\gamma}B_{\gamma\beta}$$

とふつうの行列の演算に従うことがすぐにわかる。そこでスピン演算子 S^z, S^+, S^- に対する行列要素を求め，さらに同じ行列要素をもつ演算子を

* このことは Holstein-Primakoff の方法で平方根を展開すれば同じである。

Bose 粒子の空間でつくればよい。まず

$$S_i^- \longrightarrow \sqrt{2S}\,a_i^\dagger \tag{53 a}$$

とすればよいことは (50) と (52) を比較すればわかる。次に，S^z に対しては

$$S^z|0\rangle=S|0\rangle,\quad [S^z,\ S^-]|0\rangle=-S^-|0\rangle,\quad [[S^z,\ S^-]S^-]|0\rangle=0$$

を用いれば

$$S_i^z \longrightarrow S-a_i^\dagger a_i \tag{53 b}$$

とすればよいことがわかる。同様に S^+ に対しては

$$\begin{aligned} &S^+|0\rangle=0,\quad [S^+,\ S^-]|0\rangle=2S^z|0\rangle=2S|0\rangle \\ &\qquad [[S^+,\ S^-]S^-]|0\rangle=2[S^z,\ S^-]|0\rangle=-2S^-|0\rangle \\ &\quad [[[S^+,\ S^-]S^-]S^-]|0\rangle=0 \end{aligned}$$

より

$$S_i^+ \longrightarrow \sqrt{2S}\,a_i-a_i^\dagger a_i a_i/\sqrt{2S}=\sqrt{2S}\left(1-\frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)a_i \tag{53 c}$$

とすればよいことは，右辺と a との交換関係を調べて S^+ と S^- のそれと同じであることからわかる。(53 b) は Holstein-Primakoff の変換 (39) と同じであるが，(53 a), (53 c) は (42 a, b) と違い，$a^\dagger$, a の多項式であり，前と違って平方根は含んでいない。ただし S^- と S^+ は互いに Hermite 共役な演算子であったのに，$a^\dagger$, a で表わしたものはそうはなっていない。(53 a～c) をハミルトニアン (43) に代入して整理すると

$$\mathscr{H}=\mathscr{H}_0+\mathscr{H}_1$$

$$\mathscr{H}_0=-JS^2Nz+4JSz\sum_i a_i^\dagger a_i-2JS\sum_{(i,j)}(a_i^\dagger a_j+a_j^\dagger a_j) \tag{54}$$

$$\mathscr{H}_1=-2J\sum_{(i,j)}(a_i^\dagger a_i a_j^\dagger a_j-a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_j-a_j^\dagger a_i^\dagger a_i a_i) \tag{55}$$

と書け，$\mathscr{H}_0$ は (45) と完全に一致する。スピン波間の dynamical interaction を表わす $\mathscr{H}_1$ は (48) と比べるとずっと簡単な形をしており，実際の取り扱いもずっと便利である。ただし (55) は Hermite ではないので，注意しなければならない。

Dyson は (54), (55) のハミルトニアンを用いて，低温における性質を調べ，自発磁化に対する dynamical interactin の影響が T^4 から始まること，また kinematical interaction の影響は $\exp(-\alpha J/k_B T)$ の程度で小さく，無視しうることを示した。なお S が大きい場合はいろいろな量は $1/S$ で展開できるが，Holstein-Primakoff の相互作用も摂動として取り

扱い，$1/S$ で展開して各項をていねいに計算すると，Dyson の結果を $1/S$ で展開したものと一致することを小口*が示している。

9-4 多粒子系に対する Bose 粒子近似

前節に述べた Dyson の方法は，物理量 H のある完全系 $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, $\cdots$ についての行列要素を，ふつうの方法のように $\langle\alpha|H|\beta\rangle$ で定義するのではなく，(52)つまり

$$H|\alpha\rangle=\sum H_{\beta\alpha}|\beta\rangle$$

によって定義するもので，これは $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$, $\cdots$ が互いに規格直交系をなすときにのみ $\langle\alpha|H|\beta\rangle$ に等しいが，そうでないときにも使える点で便利である。つまりある標準的な状態を $|0\rangle$，適当な演算子の組を $A_\alpha^\dagger\,(\alpha=1,2,\cdots)$ とし，状態

$$|\{n_\alpha\}\rangle=\prod_\alpha\frac{(A_\alpha^\dagger)^{n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}}|0\rangle \tag{56}$$

をつくる。この関数系は完全系をつくるものとし，これを使ってハミルトニアン H の固有値を求める。ふつうの方法では

$$\det|\langle\{n_\alpha\}|H|\{n_\alpha'\}\rangle-E\langle\{n_\alpha\}|\{n_\alpha'\}\rangle|=0 \tag{57}$$

という永年方程式を解くのであるが，(56)は必ずしも直交しているとはかぎらず，また(57)の行列要素を計算するのがむずかしいことが多い。こういう場合

$$H|\{n_\alpha\}\rangle=\sum_{\{n_\alpha'\}}H_{\{n_\alpha'\},\{n_\alpha\}}|\{n_\alpha'\}\rangle \tag{58}$$

により行列要素 $H_{\{n_\alpha\},\{n_\alpha'\}}$ を定義すれば，固有値 E をきめる永年方程式は

$$\det|H_{\{n_\alpha'\},\{n_\alpha\}}-E\delta_{\{n_\alpha'\},\{n_\alpha\}}|=0 \tag{59}$$

となる。この行列要素の計算は比較的容易なので，とくに集団運動を調べるのに(59)を用いると便利になることがある。

例：密度演算子 相互作用をする多粒子系の集団運動として密度が登場することが多い。まず点 $\boldsymbol{r}$ における粒子数密度は

$$\rho(\boldsymbol{r})=\sum_{i=1}^N\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i) \tag{60}$$

または第二量子化では

$$\rho(\boldsymbol{r})=\psi^\dagger(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{60'}$$

* T. Oguchi: Phys. Rev. **117**, 117 (1960).

で表わされる。ただしスピン自由度があるときは，(60′)はスピンについての和も含まれているものとする。(60)または(60′)の Fourier 成分は

$$\rho_{\boldsymbol{q}}=\sum_{i=1}^{N}\exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_j) \tag{61}$$

または

$$\rho_{\boldsymbol{q}}=\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}{}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}\sigma} \tag{61′}$$

で与えられる。この $\rho_{\boldsymbol{q}}$ の運動を以下で考える。

まずハミルトニアンは運動エネルギーと相互作用から成り，

$$\begin{aligned}H&=\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\epsilon_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}\sigma}{}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}\sigma}+\frac{1}{2}\sum V(\boldsymbol{q})\rho_{\boldsymbol{q}}\rho_{-\boldsymbol{q}}\\ \epsilon_{\boldsymbol{k}}&=\hbar^2\boldsymbol{k}^2/2m\end{aligned} \tag{62}$$

で与えられているものとする。(56)に対応して適当な状態 $|0\rangle$ を使って

$$|\{n_{\boldsymbol{q}}\}\rangle=\prod_{\boldsymbol{q}}\frac{(\rho_{\boldsymbol{q}})^{n_{\boldsymbol{q}}}}{\sqrt{n_{\boldsymbol{q}}!}}|0\rangle \tag{63}$$

をつくる。これに対する永年方程式を(59)に従ってつくることを考えるのであるが，(58)で定義される行列要素をつくるのに Dyson の方法を用いる。まず

$$[H,\ \rho_{\boldsymbol{q}}]=\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}})a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}{}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}\sigma} \tag{64}$$

をつくり，つづいて

$$\begin{aligned}[[H,\ \rho_{\boldsymbol{q}}]\rho_{\boldsymbol{q}'}]&=\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'}-\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}'}+\epsilon_{\boldsymbol{k}})a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}',\sigma}{}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}\sigma}\\ &=\frac{\hbar^2}{m}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{q}')\rho_{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'}\end{aligned} \tag{65}$$

をつくる。すると

$$[[[H,\ \rho_{\boldsymbol{q}}]\rho_{\boldsymbol{q}'}]\rho_{\boldsymbol{q}''}]=0 \tag{66}$$

となる。$\rho_{\boldsymbol{q}}$ に共役な量 $\pi_{\boldsymbol{q}}$ を

$$[\pi_{\boldsymbol{q}'},\ \rho_{\boldsymbol{q}}]=\frac{\hbar}{i}\delta_{\boldsymbol{q}\boldsymbol{q}'} \tag{67}$$

で定義すると，(58)と同じ行列要素を与えるハミルトニアンとして

$$\begin{aligned}\mathscr{H}=&\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}\sigma}{}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}\sigma}+\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{q}}V(\boldsymbol{q})\rho_{\boldsymbol{q}}\rho_{-\boldsymbol{q}}\\ &+\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{k}}(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}})a_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q},\sigma}{}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}\sigma}\pi_{\boldsymbol{q}}\left(\frac{i}{\hbar}\right)\\ &+\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{q}'}\frac{\hbar^2}{m}(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{q}')\pi_{\boldsymbol{q}}\pi_{\boldsymbol{q}'}\rho_{\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'}\left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\end{aligned} \tag{68}$$

を用いればよいことがわかる。ただしこの式では $\rho_{\boldsymbol{q}}$, $\pi_{\boldsymbol{q}}$ は $a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}$, $a_{\boldsymbol{k}}$ とは独立な量と考え，$\rho_{\boldsymbol{q}}$ で記述される集団励起と，$a^{\dagger}$, a で記述される個別励起とを別々に取り扱うものとする。

(68)の最後の項で $\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'=0$ の項は $\rho_0=N/\Omega$ で定数なので，π について2次になる。これと第一，二項を合わせたものを0次のハミルトニアンと考え*，第三項は集団運動と個別運動の相互作用，最後の項の $\boldsymbol{q}+\boldsymbol{q}'\neq 0$ のものは集団運動の間の相互作用を表わすものと考えることができる。とくに0次のハミルトニアンのうち集団励起を表わす部分は

$$\mathscr{H}_{0,c}=\sum_{\boldsymbol{q}}\left\{\left(-\frac{q^2}{2m}\frac{N}{\Omega}\right)\pi_{\boldsymbol{q}}\pi_{-\boldsymbol{q}}+\frac{1}{2}V(\boldsymbol{q})\rho_{\boldsymbol{q}}\rho_{-\boldsymbol{q}}\right\} \tag{69}$$

となるが，これは調和振動子の集合を表わしており，その振動数は

$$\omega_{\boldsymbol{q}}=\left\{\frac{q^2}{m}\frac{N}{\Omega}V(\boldsymbol{q})\right\}^{1/2} \tag{70}$$

で与えられることがわかる。Coulomb 相互作用のときは，(70)の $V(\boldsymbol{q})$ に**

$$V(\boldsymbol{q})=4\pi e^2/q^2$$

を代入すれば，$\omega_{\boldsymbol{q}}$ は(23)のプラズマ振動数に一致する。また Bose 粒子の Bogoljubov の取り扱いの結果のフォノンの振動数で，q が小さい極限をとったものに一致している。

演習問題 9.

1. (22)式の第二項を計算し，ϵ_{α} の $\boldsymbol{q}$ 依存性がどうなるかを調べよ。

2. (53 b), (53 c)式を証明せよ。

---

*　これは前に述べた乱雑位相近似に対応している。

**　(19)の $V(\boldsymbol{q})$ とは $1/\Omega$ の因子だけ異なることに注意。

10. 線形応答

10-1 一般論

物理学の目的は，系に外から力や熱など，何らかの刺激または乱れを与えたとき，系がどのように反応するかを調べることにあるといえる。このとき，外から与える刺激の大きさに対し，系の反応もそれに比例した範囲内で調べればよい場合が多く，これを**線形応答**(linear response)という。そしてこの反応と刺激の比例定数を**線形応答関数**とよぶ。たとえば電気伝導における Ohm の法則，弾性体における Hooke の法則は線形応答を表わした法則であり，電気抵抗率，弾性係数が線形応答関数である。また帯磁率や熱伝導率も線形応答関数である。

久保公式 線形応答関数を求める一般的方法が，久保によって与えられている*。以下でその考え方を説明する。外からの刺激が系に働く力の形で表わされるものとし，それを一般的に $F(t)$ と書こう。そしてこれのハミルトニアンへの寄与が

$$H_1=-AF(t) \tag{1}$$

という形で表わされるとする。A は系のある物理量である。外から何も働いていないときのハミルトニアンを H_0 とし，時刻 t における密度行列を $\rho(t)$ と書くと，ρ の時間変化は

$$\frac{\partial\rho(t)}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}[H_0+H_1,\ \rho(t)] \tag{2}$$

で与えられる。問題は H_1 があるときの系の性質を，H_1 の1次までの範囲で求めることにあるから，ρ も

$$\rho(t)=\rho_0+\rho_1(t) \tag{3}$$

* R. Kubo: J. Phys. Soc. Japan, **12**, 570 (1957).

$$\rho_0 = e^{-\beta H_0}/\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta H_0}] \tag{4}$$

とおいて，ρ_1 を H_1 に比例する項まで求めればよい。それには(3)を(2)に代入し，$\rho_1 \propto H_1$ として H_1 の 2 次以上の項を無視して，

$$\frac{\partial \rho_1(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\{[H_0,\ \rho_1] + [H_1,\ \rho_0]\} \tag{5}$$

を解けばよい。

(5)を解くには次のようにする。まず

$$\begin{aligned}\rho_1(t) &= e^{-iH_0t/\hbar}\tilde{\rho}_1(t)e^{iH_0t/\hbar}\\ \tilde{\rho}_1(t) &= e^{iH_0t/\hbar}\rho_1(t)e^{-iH_0t/\hbar}\end{aligned} \tag{6}$$

とおけば*，

$$\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{\rho}_1(t)}{\partial t} &= e^{iH_0t/\hbar}\left\{\frac{i}{\hbar}[H_0,\ \rho_1] + \frac{\partial \rho_1}{\partial t}\right\}e^{-iH_0t/\hbar}\\ &= -\frac{i}{\hbar}e^{iH_0t/\hbar}[H_1,\ \rho_0]e^{-iH_0t/\hbar}\end{aligned}$$

となるから，

$$\rho_1(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} e^{-iH_0(t-t')/\hbar}[H_1(t'),\ \rho_0]e^{-iH_0(t-t')/\hbar}\,dt' \tag{7}$$

と解ける。ただし $t=-\infty$ で $\rho_1=0$，つまり系は熱平衡状態にあったとする。H_1 として(1)を代入すると

$$\rho_1(t) = \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} e^{-iH_0(t-t')/\hbar}[A,\ \rho_0]e^{iH_0(t-t')/\hbar}F(t')\,dt' \tag{8}$$

と書ける。 さて H_1 があるとき，任意の物理量 B の任意の時刻 t における平均値は

$$\langle B\rangle = \mathrm{Tr}\,[\rho B] = \mathrm{Tr}\,[\rho_0 B] + \mathrm{Tr}\,[\rho_1 B] \tag{9}$$

で与えられるが，この第二項が線形応答を与える。これを ΔB と書いて，(8)を用いれば

$$\Delta B(t) = \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} \mathrm{Tr}\,[e^{-iH_0(t-t')/\hbar}[A,\ \rho_0]e^{iH_0(t-t')/\hbar}B]F(t')\,dt' \tag{10}$$

となる。これを

$$\Delta B(t) = \int_{-\infty}^{t} \phi_{BA}(t-t')F(t')\,dt' \tag{11}$$

と書くと**，線形応答関数 $\phi_{BA}(t)$ は

---

* $\tilde{\rho}_1$ は H_1 を相互作用と考えたときの相互作用表示になっている。

** $t=-\infty$ での積分の収束が問題になるときは，$e^{\eta t'}$ $(\eta \to 0+)$ という因子が入っていると考える。

$$\phi_{BA}(t)=\frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}\,[[A,\ \rho_0]B_{\mathrm{H}}(t)] \tag{12}$$

と書ける。ただし

$$B_{\mathrm{H}}(t)=e^{iH_0t/\hbar}Be^{-iH_0t/\hbar} \tag{13}$$

は，H_0 における Heisenberg 表示の B である。

次に(12)を違う形に書き直してみる。まず Tr の性質を使えば

$$\phi_{BA}(t)=\frac{i}{\hbar}\mathrm{Tr}\,[\rho_0[B_{\mathrm{H}}(t),\ A]] \tag{14}$$

と書けることは明らかであろう。(11) の形からわかるように，この式に現われる t は常に正であるので，この $\phi_{BA}(t)$ は (6·8 a) の有限温度に拡張した遅延 Green 関数にほかならないことがわかる。すなわち

$$\theta(t)\phi_{BA}(t)=-\frac{1}{\hbar}\mathscr{G}_{BA}{}^{\mathrm{R}}(t) \tag{15}$$

であり，(11)は

$$\varDelta B(t)=-\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathscr{G}_{BA}{}^{\mathrm{R}}(t-t')F(t')dt' \tag{12'}$$

と書ける。

公式　(4)を用いると次の公式が得られる。

$$[A,\ \rho_0]=\rho_0\int_0^\beta e^{\lambda H}[A,\ H_0]e^{-\lambda H_0}d\lambda \tag{16}$$

証明　A, B を任意の演算子とすると

$$[A,\ e^{-\beta B}]=-e^{-\beta B}(e^{\beta B}Ae^{-\beta B}-A)$$

であるが，

$$A(\beta)=e^{\beta B}Ae^{-\beta B}$$

に対して

$$\frac{\partial A(\beta)}{\partial\beta}=e^{\beta B}[B,\ A]e^{-\beta B}$$

が成り立つので，$A(0)=A$ であることを用いて

$$A(\beta)=A+\int_0^\beta e^{\lambda B}[B,\ A]e^{-\lambda B}d\lambda$$

となるので，

$$[A,\ e^{-\beta B}]=e^{-\beta B}\int_0^\beta d\lambda e^{\lambda B}[A,\ B]e^{-\lambda B} \tag{17}$$

となり，(16)が得られる。(証明終わり)

(16)を(12)に代入し，A の Heisenberg 表示 A_{H} を用いれば

$$\phi_{BA}(t)=\int_0^\beta d\lambda\,\mathrm{Tr}\,[\rho_0\dot{A}_{\mathrm{H}}(-i\hbar\lambda)B_{\mathrm{H}}(t)] \tag{18}$$

または

$$\phi_{BA}(t)=-\int_0^\beta d\lambda\,\mathrm{Tr}\,[\rho_0A_{\mathrm{H}}(-i\hbar\lambda)\dot{B}_{\mathrm{H}}(t)] \tag{19}$$

$$=-\int_0^\beta d\lambda\,\mathrm{Tr}\,[\rho_0A\dot{B}_{\mathrm{H}}(t+i\hbar\lambda)] \tag{19'}$$

とも表わされる。

振動数表示　線形応答でよく問題になるのは，外力 $F(t)$ が振動数 ω で振動している場合，すなわち

$$F(t)=F_0\cos\omega t$$

という形をしている場合である。このとき(11)は

$$\varDelta B(t)=\mathrm{Re}\left[\chi_{BA}(\omega)F_0e^{-i\omega t}\right] \tag{20}$$

と書け，

$$\chi_{BA}(\omega)=\int_0^\infty\phi_{BA}(t)e^{i\omega t}dt \tag{21}$$

となる。交流（または電磁波）に対する電気伝導度や帯磁率などは $\chi_{BA}(\omega)$ の例である。これを（一般化された）**アドミッタンス** (admittance) とよんでおく。

ここで $\chi_{BA}(\omega)$ と $\phi_{BA}(t)$ の Fourier 変換 $f_{BA}(\omega)$ との関係を調べておく。

$$\begin{aligned}f_{BA}(\omega)&=\int_{-\infty}^\infty\phi_{BA}(t)e^{i\omega t}dt\\ \phi_{BA}(t)&=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty f_{BA}(\omega)e^{-i\omega t}d\omega\end{aligned} \tag{22}$$

とおいて，これを(21)に代入する。すると

$$\begin{aligned}\chi_{BA}(\omega)&=\frac{1}{2\pi}\int_0^\infty dte^{i\omega t}\int_{-\infty}^\infty d\omega' f_{BA}(\omega')e^{-i\omega' t}\\ &=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty d\omega' f_{BA}(\omega')\frac{-1}{i(\omega-\omega')-\eta}\\ &=\frac{1}{2}f_{BA}(\omega)+\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^\infty\frac{P}{\omega-\omega'}f_{BA}(\omega')d\omega'\end{aligned} \tag{23}$$

となり，$\chi_{BA}(\omega)$ が $f_{BA}(\omega)$ で表わされる。

10-2　電気伝導度

前節での議論の応用例の一つとして，まず電気伝導度を考えてみる。系は N 個の粒子から成り，それぞれの粒子の質量，電荷を m_i, e_i ($i=1, 2, \cdots, N$) とする。また外部磁場がある場合も考慮してハミルトニアンを

$$H_0=\sum_{i=1}^N\frac{1}{2m_i}\left\{\boldsymbol{p}_i-\frac{e_i}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i)\right\}^2+V(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N) \tag{24}$$

とする。ただし $\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}=\boldsymbol{H}$ が外部磁場である。

空間的に一様な電場 $\boldsymbol{E}(t)$ がかかると，ハミルトニアンには

$$H_1 = -\sum_{i=1}^{N} e_i \boldsymbol{r}_i \cdot \boldsymbol{E}(t) \tag{25}$$

という項がつけ加わる。このとき全電流

$$\boldsymbol{J} = \sum_{i=1}^{N} \boldsymbol{e}_i \cdot \dot{\boldsymbol{r}}_i \tag{26}$$

の平均値を $\boldsymbol{E}$ の1次の項まで計算すればよい。それには前節の議論で，$A=\sum_i e_i \boldsymbol{r}_i$, $B=\sum_i e_i \dot{\boldsymbol{r}}_i$ とすればよいので，電場が ν 方向で μ 方向の電流を考えることにし，このときの線形応答関数 $\phi_{BA}(t)$ を $\phi_{\mu\nu}(t)$, (21)の $\chi_{BA}(\omega)$ を $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ と書くことにすると，まず(18)より

$$\begin{aligned}\phi_{\mu\nu}(t) &= \int_0^\beta d\lambda \, \mathrm{Tr}\,[\rho_0 J_\mu(-i\hbar\lambda) J_\nu(t)] \\ &= \int_0^\beta d\lambda \langle J_\mu(-i\hbar\lambda) J_\nu(t) \rangle\end{aligned} \tag{27}$$

と表わされる。

(27)の右辺は，熱平衡における電流のゆらぎを表わしている。一方 $\phi_{\mu\nu}$ から得られる $\sigma_{\mu\nu}$ は，外からの電場のエネルギーが系内で消費される割合に逆比例する。つまり左辺はエネルギーの散逸の大きさのめやすになるものである。このように外からつぎこんだエネルギーの散逸を表わす定数(通常輸送係数とよばれる)と，熱平衡におけるゆらぎの大きさが比例していることは，いくつかの例について知られていたが，前節の一般論はこれが一般的に成り立つことを示していることになる。これを一般的に**揺動-散逸定理**(fluctuation-dissipation theorem)とよび，非平衡の統計力学において重要な役を演じている。

次に $\phi_{\mu\nu}(t)$ を(14)の形に表わすと，$t=0$ では

$$\Big[\sum_i e_i \dot{x}_{i\mu},\ \sum_i e_i x_{i\nu}\Big] = \sum_i e_i^2 [\dot{x}_{i\mu},\ x_{i\nu}]$$

という量が現われる。ただし $\boldsymbol{r}_i$ の μ 成分を $x_{i\mu}$ と書いた。これを

$$\dot{x}_{i\mu} = \frac{i}{\hbar}[H_0,\ x_{i\mu}]$$

から計算し，H_0 として(24)を用いると

$$[\dot{x}_{i\mu},\ x_{j\nu}] = -\frac{\hbar}{i}\frac{1}{m_i}\delta_{\mu\nu}\delta_{ij}$$

が得られるので，

$$\phi_{\mu\nu}(0) = \sum_{i=1}^{N} \frac{e_i^2}{m_i} \tag{28}$$

と簡単になってしまう。

上式を電気伝導度 $\sigma_{\mu\nu}(\omega)$ に結びつけるには，(22)より

$$\phi_{\mu\nu}(0)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}f_{\mu\nu}(\omega)d\omega$$

が成立していること，および(23)を用いる。つまり

$$\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\sigma_{\mu\nu}(\omega)d\omega=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}f_{\mu\nu}(\omega)d\omega=\phi_{\mu\nu}(0)$$

および

$$\lim_{\omega\to\infty}\omega\sigma_{\mu\nu}(\omega)=\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}f_{\mu\nu}(\omega')d\omega'=i\phi_{\mu\nu}(0)$$

を用い，

$$\begin{aligned}\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\sigma_{\mu\nu}(\omega)d\omega&=\sum_{i=1}^{N}\frac{e_i^2}{m_i}\\ \lim_{\omega\to\infty}i\omega\sigma_{\mu\nu}(\omega)&=\sum_{i=1}^{N}\frac{e_i^2}{m_i}\end{aligned}\tag{29}$$

という関係式が得られる。この右辺は全粒子が同じ場合は

$$右辺=Ne^2/m$$

と書かれるもので，系のハミルトニアンが(24)の形をしていれば，もっと詳しくいうとポテンシャル・エネルギーが粒子の位置だけの関数ならば成立している。これを**和則**(sum rule)とよび，電気伝導度の一つの重要な性質になっている*。

10-3 電子気体における遮蔽効果

前節の電場に対する線形応答を別の形で考えてみる。簡単のため磁場はないものとして，電場 $\boldsymbol{E}$ をスカラー・ポテンシャル $\varphi(\boldsymbol{x},t)$ で表わす。

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=-\mathrm{grad}\,\varphi(\boldsymbol{r},t)\tag{30}$$

するとハミルトニアン(25)は

$$H_1=\int d^3\boldsymbol{r}\rho(\boldsymbol{r})\varphi(\boldsymbol{r},t)\tag{31}$$

で与えられる。ただし $\rho(\boldsymbol{r})$ は電荷密度で

$$\rho(\boldsymbol{r})=\sum_{i=1}^{N}e_i\delta(\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r})\tag{32}$$

---

* 電気伝導度をある近似で計算したとき，その結果が和則を満たしているかどうかで，近似の良否が判定できる。

で定義される演算子である。

以後は電子気体に話を限り，(32)を第二量子化の形で表わしておく。つまり電子の電荷を $-e$ として

$$\rho(\boldsymbol{r})=-e\sum_s\psi_s{}^\dagger(\boldsymbol{r})\psi_s(\boldsymbol{r}) \tag{32'}$$

とする。この $\varphi(\boldsymbol{r},t)$ に対する電荷密度の線形応答は，(12′)を用いて

$$\varDelta\rho(\boldsymbol{r})=+\frac{e^2}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\int D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}t\,;\boldsymbol{r}'t')\varphi(\boldsymbol{r}',t')d^3\boldsymbol{r}'dt' \tag{33}$$

と表わされる。ただし $g_{AB}{}^{\mathrm{R}}$ のかわりに D^{R} と書いた。つまり

$$\begin{aligned}D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}t\,;\boldsymbol{r}'t)&=-i\theta(t-t')\langle[\sum_s\psi_s{}^\dagger(\boldsymbol{r},t)\psi_s(\boldsymbol{r},t),\ \sum_{s'}\psi_{s'}{}^\dagger(\boldsymbol{r}',t')\psi_{s'}(\boldsymbol{r}',t')]\rangle\\&=-i\theta(t-t')\langle[n(\boldsymbol{r},t),\ n(\boldsymbol{r}',t')]\rangle\end{aligned} \tag{34}$$

で定義される2体の Green 関数である。

系は一様だから D^{R} は $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$ と $t-t'$ のみの関数であり，Fourier 変換を用いれば，(33)は

$$\varDelta\rho(\boldsymbol{q},\omega)=+\frac{e^2}{\hbar}D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)\varphi(\boldsymbol{q},\omega) \tag{35}$$

と書ける。(34)の D^{R} は遅延 Green 関数であるが，7章と同じように温度 Green 関数を

$$\mathscr{D}(\boldsymbol{r}\tau\,;\boldsymbol{r}'\tau')=-\langle\mathrm{Tr}\,[\{n(\boldsymbol{r},\tau)-n_0\}\{n(\boldsymbol{r}',\tau')-n_0\}]\rangle \tag{36}$$

で定義する。ただし n_0 は粒子数密度の平均値である。するとこれの Fourier 変数 $\mathscr{D}(\boldsymbol{q},\nu_n)$ $(\nu_n=2\pi nk_{\mathrm{B}}T/\hbar,\ n=0,\ \pm1,\ \pm2,\cdots)$ は，$D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)$ と密接な関係にあり

$$D^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\,\frac{\varDelta(\boldsymbol{q},\omega')}{\omega-\omega'+i\eta} \tag{37}$$

ならば

$$\mathscr{D}(\boldsymbol{q},\nu_n)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\,\frac{\varDelta(\boldsymbol{q},\omega')}{i\nu_n-\omega'} \tag{38}$$

となることが容易に示される。

(36) で $n(\boldsymbol{r},\tau)$ 自身でなく，n_0 を引いた量を用いたのは，(34) では $n(\boldsymbol{r},\tau)$ の H_0 について対角的な部分からの寄与はないので，(36) でも同じ部分の寄与がないようにしたためである。一般に A, B を任意の物理量として

$$\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{R}}(t,t')=-i\theta(t-t')\langle[A(t),\ B(t')]\rangle \tag{39}$$

の Fourier 変換を(37)のようにスペクトル表示したとき

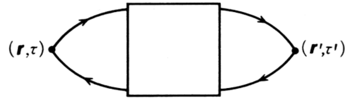
$$\widetilde{\mathscr{G}}_{AB}(\tau,\tau')=-\langle\mathrm{T}_\tau\,[A(\tau)B(\tau')]\rangle \tag{40}$$

の Fourier 変換は，(38)のようには表わされず，

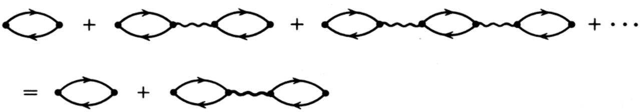
$$\mathscr{G}_{AB}(\tau,\tau')=-\langle \mathrm{T}_\tau[\{A(\tau)-A_0\}\{B(\tau')-B_0\}]\rangle \tag{40'}$$

の Fourier 変換が(38)のように書き表わされる。ただし A_0, B_0 は A, B のハミルトニアン H についての対角部分，つまり，H と可換な部分である。

$\mathscr{D}(\boldsymbol{r}\tau\,;\boldsymbol{r}'\tau')$ の計算　温度 Green 関数は，摂動展開をすると，Feynmann グラフが使えるので便利である。(36) の $\mathscr{D}(\boldsymbol{r}\tau\,;\boldsymbol{r}'\tau')$ を電子間の相互作用について摂動展開すると，その一般項は10·1図のような形をしている。(36) では $n(\boldsymbol{r},\tau)$ から n_0 を引いてあるので，2点 $(\boldsymbol{r},\tau)$ と $(\boldsymbol{r}',\tau')$ がつながっていないグラフからの寄与がない。ここで 7–3 での電子気体の相互作用の取り扱いを思い出すと，重要なグラフは相互作用がリング状につながり，各相互作用における運動量の移動がすべて等しいものであった。そこで 10·1 図に対応するグラフとして 10·2 図に示したものだけをとることにする。



10·1 図



10·2 図

この図から明らかなように，Fourier 変換で表わすと

$$\begin{aligned}\mathscr{D}(\boldsymbol{q},\nu_n)&=\frac{1}{\hbar}\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n)+\frac{1}{\hbar}\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n)U(\boldsymbol{q},\nu_n)\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n)\\&=\frac{\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n)/\hbar}{1-V(\boldsymbol{q})\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n)}\end{aligned} \tag{41}$$

となる。ただし(7·54)を使った。(41)の ν_n を $-i\omega$ に解析接続した関数を $\Pi_0{}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)$ と書けば，(35)は

$$\varDelta\rho(\boldsymbol{q},\omega)=e^2\frac{\Pi_0{}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)}{1-V(\boldsymbol{q})\Pi_0{}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)}\varphi(\boldsymbol{q},\omega) \tag{42}$$

と書くことができる。相互作用のない自由電子の場合は，この式の分母が1であり，それに比べると(40)は

$$\frac{1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)}=\frac{1}{1-V(\boldsymbol{q})\Pi_0{}^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},\omega)}$$

倍になっている。この $\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)$ がこの系の**電媒定数**にあたる。

電子気体が縮退している場合，小さい q に対して $\Pi_0(\boldsymbol{q},\nu_n)$ は計算され

ており，その結果が(7·60)で与えられている。とくに $\omega=0$ のときは(7·60)は

$$\Pi_0^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{q},0)\simeq-\frac{mk_{\mathrm{F}}}{\pi^2\hbar^2} \tag{43}$$

なので，(40)は

$$\Delta\rho(\boldsymbol{q},0)=-e^2\frac{(mk_{\mathrm{F}}/\pi^2\hbar^2)}{q^2+(mk_{\mathrm{F}}/\pi^2\hbar_2)(4\pi e^2)}q^2\varphi(\boldsymbol{q},0)$$

となる。$\varphi(\boldsymbol{q},0)$ が原点にある点電荷によるものであるときは，

$$\varphi(\boldsymbol{q},0)=4\pi e/q^2$$

で，$q\to0$ で発散するのに対し，$\varphi(\boldsymbol{q},0)/\epsilon(\boldsymbol{q},0)$ は発散しない。これは前にも述べたように Coulomb 力の遠距離の部分が他の電子のために遮蔽されることを表わしている。

10-4　磁場に対する応答，帯磁率

ここでは簡単のため，空間的に一様な磁場 $\boldsymbol{H}(t)$ のみを考える。この磁場の影響はハミルトニアンに

$$H_1=-\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{H}(t) \tag{44}$$

という項を入れることによって考慮することができる。$\boldsymbol{M}$ は系の全磁化である。このとき磁場 $\boldsymbol{H}$ の1次までの範囲で計算すると，系の磁化の平均値の変化は

$$\Delta M_\mu(t)=\sum_\nu\int_0^t\phi_{\mu\nu}(t-t')H_\nu(t')dt' \tag{45}$$

という形に書かれ，応答関数 $\phi_{\mu\nu}(t)$ は **10-1** の一般論によって

$$\phi_{\mu\nu}(t)=\frac{i}{\hbar}\langle[M_\mu(t),\ M_\nu]\rangle \tag{46}$$

で与えられる。

また帯磁率 $\chi_{\mu\nu}(\omega)$ は(21)より

$$\chi_{\mu\nu}(\omega)=\int_0^\infty\phi_{\mu\nu}(t)e^{i\omega t}dt \tag{47}$$

で与えられるが，とくに $\omega=0$ の静的帯磁率*はもっと簡単な形に表わされる。$\phi_{\mu\nu}$ に対して(19)の形を用いると

$$\chi_{\mu\nu}(0)=-\int_0^\infty dt\int_0^\beta\langle M_\nu(-i\hbar\lambda)\dot{M}_\mu(t)\rangle d\lambda \tag{48}$$

* 磁場が時間によらず一定のときの帯磁率。

なので，t についての積分は容易に実行できる。ただし注意すべきことは

$$\int_0^\infty \dot{M}_\mu(t)\,dt = M_\mu(t)\Big|_0^\infty = M_\mu(\infty) - M_\mu(0)$$

であるが，$M_\mu(\infty)$ として何をとるかである。前節でも述べたように (46) では M_μ の対角部分は $\phi_{\mu\nu}$ に寄与しない。したがって(48)にも寄与はないはずである。一方(48)のような平均値で，$t\to\infty$ のときは M_μ の非対角部分は t について振動しているため消えてしまう。したがって $M_\mu(\infty)$ としては $M_\mu{}^0$(M_μ の対角部分)をとっておけばよい。こうして(48)は

$$\chi_{\mu\nu}(0) = \int_0^\infty \langle \{M_\nu(-i\hbar\lambda) - M_\nu{}^0\}(M_\mu - M_\mu{}^0)\rangle d\lambda \tag{49}$$

で与えられる。

ところで磁場 $\boldsymbol{H}$ が時間によらず一定のときは，磁化 $\boldsymbol{M}$ の平均値は

$$\langle \boldsymbol{M}\rangle = \mathrm{Tr}\,[e^{-\beta(H_0-\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{H})}\boldsymbol{M}]/\mathrm{Tr}\,[e^{-\beta(H_0-\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{H})}] \tag{50}$$

で与えられる。(50)を $\boldsymbol{H}$ の1次までの範囲で計算すると

$$\langle M_\mu\rangle = \langle M_\mu\rangle_0 + \sum_\nu \int_0^\beta d\lambda \{\langle M_\nu(-i\hbar\lambda) M_\mu\rangle_0 - \langle M_\nu\rangle_0 \langle M_\mu\rangle_0\} H_\nu \tag{51}$$

となる。

断熱帯磁率と等温帯磁率　(49)と(51)は一般的には違っている。この差についてもう少し詳しく考えてみる。それにはまず **10-1** の議論をもっとていねいにやり直す必要がある。問題は外力が時間によらない場合なので状態 $\boldsymbol{\Phi}_\alpha(t)$ に対する Schrödinger 方程式を

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\Phi}_\alpha(t) = (H_0 + H_1)\boldsymbol{\Phi}_\alpha(t)$$

と書き，

$$\boldsymbol{\Phi}_\alpha(t) = e^{-iH_0t/\hbar}\tilde{\boldsymbol{\Phi}}_\alpha(t) \tag{52}$$

とおく。すると

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\boldsymbol{\Phi}}_\alpha(t) = e^{iH_0t/\hbar}H_1e^{-iH_0t/\hbar}\tilde{\boldsymbol{\Phi}}_\alpha(t) \tag{53}$$

となるので，これを H_1 の1次までの近似で求めると

$$\tilde{\boldsymbol{\Phi}}_\alpha(t) = \left\{1 - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^t e^{iH_0t'/\hbar}H_1e^{-iH_0t'/\hbar}dt'\right\}\boldsymbol{\Phi}_{\alpha0} \tag{54}$$

となる。ただし $t\to-\infty$ で状態は H_0 の固有状態 $\boldsymbol{\Phi}_{\alpha0}$ にあったとする。(53)を(52)に代入し，物理量 B の期待値を求めると

$$\langle\boldsymbol{\Phi}_\alpha(t)|B|\boldsymbol{\Phi}_\alpha(t)\rangle$$
$$= \langle\boldsymbol{\Phi}_{\alpha0}|B|\boldsymbol{\Phi}_{\alpha0}\rangle + \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t'} dt'\langle\boldsymbol{\Phi}_{\alpha0}|[e^{iH_0t'/\hbar}H_1e^{-iH_0t'/\hbar},\ e^{iH_0t/\hbar}Be^{-iH_0t/\hbar}]|\boldsymbol{\Phi}_{\alpha0}\rangle$$

となる。したがって H_1 による B の期待値の変化は

$$\Delta B_\alpha(t)=\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}dt'\langle\Phi_{\alpha0}|[e^{iH_0t'/\hbar}H_1e^{-iH_0t'/\hbar},\ e^{iH_0t/\hbar}Be^{-iH_0t/\hbar}]|\Phi_{\alpha0}\rangle \tag{55}$$

となる。(55)は一つの状態 α についての期待値であるが，これの統計平均を求めるのに二つの方法がある。第一は $\Phi_{\alpha0}$ のエネルギーを $E_\alpha{}^0$ とし，すなわち

$$H_0\Phi_{\alpha0}=E_\alpha{}^0\Phi_{\alpha0}$$

として，$\Phi_{\alpha0}$ の実現している確率が

$$\exp(-\beta E_\alpha{}^0)$$

に比例するとするものである。第二は H_1 のため本当のエネルギーは H_0+H_1 の固有値であり，これを H_1 の1次まで求めれば

$$E_\alpha{}^0+\langle\Phi_{\alpha0}|H_1|\Phi_{\alpha0}\rangle\equiv E_\alpha{}^0+\epsilon_\alpha$$

となるので，時刻 t で $\Phi_\alpha(t)$ が実現されている確率は

$$\exp\{-\beta(E_\alpha{}^0+\epsilon_\alpha)\}$$

に比例するとするものである。つまり B の平均値の変化として

$$\Delta\langle B\rangle(t)=\frac{1}{Z_0}\sum_\alpha\exp(-\beta E_\alpha{}^0)\Delta B_\alpha(t) \tag{56}$$

とするか

$$\Delta\langle B\rangle'(t)=\frac{1}{Z}\sum_\alpha\exp\{-\beta(E_\alpha{}^0+\epsilon_\alpha)\}\Delta B_\alpha(t) \tag{56'}$$

をとるかである。ただし

$$Z_0=\sum_\alpha\exp(-\beta E_\alpha{}^0),\quad Z=\sum_\alpha\exp\{-\beta(E_\alpha{}^0+\epsilon_\alpha)\} \tag{57}$$

である。

(56)，(56′)の物理的意味は次の通りである。外からの力によって状態も変わるとともに，そのエネルギーも変化する。(56)は状態の変化だけを考慮に入れ，エネルギーが変化してもその状態の実現確率は元のままであるとするものである。つまり状態の分布は前のままである。これは統計力学でいえばエントロピーが一定ということであり，断熱変化に相当する。一方(56′)ではエネルギーの変化につれ，分布も変化し，系は常に熱浴と熱平衡にある。したがってこの変化は等温変化といえる。

(55)および $H_1=-AF$ を(56)に代入し

$$\langle A\rangle=\mathrm{Tr}\,[\rho A]=\frac{1}{Z_0}\sum_\alpha e^{-\beta E_\alpha{}^0}\langle\Phi_{\alpha0}|A|\Phi_{\alpha0}\rangle$$

を使えば，(56)は

$$\Delta\langle B\rangle(t)=\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{t}\langle[B_{\rm H}(t),\ A_{\rm H}(t')]\rangle dt'F$$

となり，(14)にほかならない。つまり一般論で求めたのは断熱変化による線形応答であり，(49) は断熱帯磁率である。他方 $H_1=-\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{H}$ として $\Delta B_\alpha(t)$ を計算し，(56′)に代入すれば等温帯磁率を与え，それが(51)の第二項になることは容易に示すことができる。

演習問題 10.

1. ハミルトニアン(24)式を用い，

$$[\dot{x}_{i\mu},\ x_{j\nu}]=-\frac{\hbar}{i}\frac{1}{m_i}\delta_{\mu\nu}\delta_{ij}$$

を証明せよ。

2. (40) と (40′) 式の Fourier 変換のスペクトル表示を求め，(38)のスペクトル関数と比較せよ。

3. (51)式の第二項が(56′)に対応していることを証明せよ。

4. (51)式の第二項を用いて，自由電子 (スピン 1/2) のスピンによる等温帯磁率を計算せよ。また(56)の断熱帯磁率はどうなるか。

参 考 書

物性論における多体問題の参考書として，気のついたものをあげておく。超伝導，液体ヘリウムの超流動，Heisenberg モデルなど，本書で取り上げた例題についても，多くのすぐれた参考書があるが，ここではふれないことにする。

まず日本人によって書かれたものをあげる。初心者用としては

1) 阿部龍蔵：統計力学（東京大学出版会，1966）
2) 山内恭彦，武田暁編：大学演習 量子物理学（裳華房，1974）

がある。前者は統計力学の基礎的問題を詳しく解説してあり，厚さも適当で読みやすい。後者は例題形式でいろいろな問題にふれており，とくに Hartree-Fock 近似までの話に慣れるのに便利であろう。

また本シリーズ中の

3) 高橋康：物性研究者のための 場の量子論 I（培風館，1974）

は題名の通り場の量子論に基づいて多体問題的な方法をわかりやすく解説してある。

やや特殊なものとしては

4) 沢田克郎：多体問題（岩波書店，1971）

があり，ユニークな見方で，とくに Hartree-Fock，乱雑位相近似について詳しく解説してある。

次に外国人によって書かれたものをあげる。

5) A. L. Fetter and J. D. Walecka : *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, 1971)

はいろいろな問題，方法がきわめて詳しく説明してあり，数学的にも詳しく，便利な本で，本書でもしばしば引用した。

6) A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov and I. E. Dzyaloshinski : *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics* (Pergamon Press, 1965)
［松原武生他訳：統計物理学における場の量子論の方法（東京図書，1970)］

は Green 関数とその応用に詳しく，Green 関数に習熟しようとするものにとっては最適の教科書といえる。

以上のほかに

7) D. J. Thouless : *The Quantum Mechanics of Many-Body Systems* (Academic Press, 1972)
［松原武生他訳：多体系の量子力学（吉岡書店，1965)］

は物理的な意味をつかむのに適しており，

8) D. Pines 編 : *The Many-Body Problem* (Benjamine, 1963)

はいろいろな問題の解説と，主な論文を集めてある。

演習問題解答

演習問題 1.

1. $\mathrm{Tr}[AB]=\sum_n (AB)_{nn}=\sum_n(\sum_m A_{nm}B_{mn})$ であるから，m と n の和の順序を入れかえて

$$\mathrm{Tr}[AB]=\sum_m(\sum_n B_{mn}A_{nm})=\sum_m(BA)_{mm}=\mathrm{Tr}[BA]$$

この性質を用いれば　$\mathrm{Tr}\,A'=\mathrm{Tr}[UAU^{-1}]=\mathrm{Tr}[U^{-1}UA]=\mathrm{Tr}\,A$

2. (15)の第一項については本文で証明した。第二項の平均値は

$$\frac{1}{2}\sum_{i\neq j=1}^{N}\sum^{N}\sum_n e^{-\beta E_n}\int\cdots\int d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N\Psi_n{}^*(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)a_2(i,j)\Psi_n(\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N)$$

と書けるので，(14)の定義を用いれば

$$\frac{1}{2}\sum_{i\neq j=1}^{N}\sum^{N}\int d^3\boldsymbol{r}_i d^3\boldsymbol{r}_j\frac{(N-2)!}{N!}a_2(i,j)\rho_2(i,j\,;\,i,j)=\frac{1}{2}\mathrm{Tr}[\rho_2 a_2]$$

〔$i,\ j$ の和が $N(N-1)$ を与える〕

3. まず簡単な Fermi 粒子系について証明する。(24)より

$$\int\cdots\int\Phi_n{}^*(x_1,\cdots,x_N)\Phi_{n'}(x_1,\cdots,x_N)dx_1\cdots dx_N=\frac{1}{N!}\sum_P\sum_{P'}(-1)^{\epsilon_P+\epsilon_{P'}}$$

$$\times\int\cdots\int P[\varphi_{k_1}{}^*(x_1)\cdots\varphi_{k_N}{}^*(x_N)]P'[\varphi_{k_1'}(x_1)\cdots\varphi_{k_N'}(x_N)]dx_1\cdots dx_N \qquad ①$$

であるが，$P'=P''P$ とおくと，$\epsilon_{P'}=\epsilon_{P''P}=\epsilon_{P''}+\epsilon_P$ なので，上式は

$$\frac{1}{N!}\sum_P\sum_{P''}(-1)^{2\epsilon_P+\epsilon_{P''}}\int\cdots\int\varphi_{k_1}{}^*(x_1)\cdots\varphi_{k_N}{}^*(x_N)$$

$$\times P''[\varphi_{k_1'}(x_1)\cdots\varphi_{k_N'}(x_N)]dx_1\cdots dx_N \qquad ②$$

と書ける。ただし，$P[x_1\cdots x_N]=x_{i_1}\cdots x_{i_N}$ とし，積分変数 $x_{i_1}\cdots x_{i_N}$ を改めて $x_1\cdots x_N$ と書いてある。上式の積分は P を含まないので，$\sum_P$ は $N!$ を与える〔$(-1)^{2\epsilon_P}=1$〕。次に

$$P''[\varphi_{k_1'}(x_1)\cdots\varphi_{k_N'}(x_N)]=\varphi_{k_1'}(x_{j_1})\cdots\varphi_{k_N'}(x_{j_N})$$

であるが ($P''[x_1\cdots x_N]=x_{j_1}\cdots x_{j_N}$)，これはまた $P''^{-1}[k_1'\cdots k_N']=k_1''\cdots k_N''$ とすると $\varphi_{k_1''}(x_1)\cdots\varphi z_{N''}(x_N)$ と書ける。したがって初めの積分は

$$\sum_{P''}(-1)^{\epsilon_{P''}}\int\varphi_{k_1}{}^*(x_1)\varphi_{k_1''}(x_1)dx_1\cdots\int\varphi_{k_N}{}^*(x_N)\varphi_{k_N''}(x_N)dx_N$$

$$=\sum_{P''}(-1)^{\epsilon_{P''}}\delta_{k_1k_1''}\delta_{k_2k_2''}\cdots\delta_{k_Nk_N''} \qquad ③$$

となる。$(k_1''\cdots k_N'')$ は $(k_1'\cdots k_N')$ のある置換であるから，これは集合 $(k_1'\cdots k_N')$ が $(k_1\cdots k_N)$ と一致するときにのみ残る。二つの集合が一致するときは，ある P'' に対してのみ値をもち，他の P'' では 0 になる。したがって初めの積分は $(\pm1)\delta_{nn'}$

となるが，初めの行列式の順序をうまくとっておけば，いつも $\delta_{nn'}$ になる。

【Bose 系】 この場合も Fermi 系の場合と全く同じように計算でき，③まではそのまま進むことができる。ただし規格化因子と符号の差を考慮して，

$$\int\cdots\int \Phi_n^*(x_1,\cdots,x_N)\Phi_{n'}(x_1,\cdots,x_n)dx_1\cdots dx_N$$
$$=\frac{1}{\sqrt{\prod_k n_k!\prod_k n_k'!}}\sum_{P''}\delta_{k_1k_1''}\delta_{k_2k_2''}\cdots\delta_{k_Nk_N''}$$

となる。最後の Kronecker のデルタより，これは二つの集合 $(k_1\cdots k_N)$ と $(k_1'\cdots k_N')$ が一致するときにのみ残ることがわかる。その場合はもちろん $n_k=n_k'$ であり，同じ k が n_k 個含まれていれば，その n_k 個の間の置換はすべて 1 を与えるので，1 を与える置換 P'' の個数はちょうど $\prod_k n_k!$ になる。こうして二つの集合が一致するときは 1 で，他の場合は 0 になることが示された。

4. 【Fermi 系】 (29) を書き下すと

$$\sum_n \Phi_n^*(x_1,\cdots,x_n)\Phi_n(x_1',\cdots,x_n')$$
$$=\sum_n\frac{1}{N!}\sum_P\sum_{P'}(-1)^{\epsilon_P+\epsilon_{P'}}P[\varphi_{k_1}^*(x_1)\cdots\varphi_{k_N}^*(x_N)]P'[\varphi_{k_1}(x_1')\cdots\varphi_{k_N}(x_N')]$$

ここで

$$P[x_1\cdots x_N]=y_1\cdots y_N,\quad P'[x_1'\cdots x_N']=y_1'\cdots y_N'$$

と書くと，上式は

$$\sum_n\frac{1}{N!}\sum_P\sum_{P'}(-1)^{\epsilon_P+\epsilon_{P'}}\varphi_{k_1}^*(y_1)\varphi_{k_1}(y_1')\cdots\varphi_{k_N}^*(y_N)\varphi_{k_N}(y_N')$$

となる。ここで $\sum_n$ は $\frac{1}{N!}\sum_{k_1}\cdots\sum_{k_N}$ ($k_1\cdots k_N$ の中に同じものがあれば P または P' で和をとれば自動的に 0 になるし，すべてが違うときは一つの集合を $N!$ 回数えている) であるので

$$\frac{1}{(N!)^2}\sum_P\sum_{P'}(-1)^{\epsilon_P+\epsilon_{P'}}\delta(y_1-y_1')\cdots\delta(y_N-y_N')$$

となる。ここで $P=P''P'$ と書くと上式は

$$\frac{1}{(N!)^2}\sum_{P''}\sum_{P'}(-1)^{\epsilon_{P''}}[P''P']_x[P']_{x'}\delta(x_1-x_1')\cdots\delta(x_N-x_N')$$

と書ける。ただし $[P''P']_x$ は右にある $x_1\cdots x_N$ に施す置換，$[P']_{x'}$ は $x_1'\cdots x_N'$ に施す置換を表わす。ところが $[P']_x[P']_{x'}\delta(x_1-x_1')\cdots\delta(x_N-x_N')=\delta(x_1-x_1')\cdots\delta(x_N-x_N')$ なので

$$\sum_n\Phi_n^*(x_1\cdots x_N)\Phi_{n'}(x_1'\cdots x_N')=\frac{1}{N!}\sum_P(-1)^{\epsilon_P}[P]_x[\delta(x_1-x_1')\cdots\delta(x_N-x_N')]$$

となり，(29) が成り立つ。

【Bose 系】 前と同じようにして

$$\sum_n\Phi_n^*(x_1,\cdots,x_N)\Phi_n(x_1',\cdots,x_N')$$
$$=\sum_n\frac{1}{N!}\frac{1}{\prod_k n_k!}\sum_P\sum_{P'}\varphi_{k_1}^*(y_1)\varphi_{k_1}(y_1')\cdots\varphi_{k_N}^*(y_N)\varphi_{k_N}(y_N')$$

となることはすぐにわかる。ここで独立な状態についての和 $\sum\limits_{n}$ は,

$$\sum_{n}=\sum_{k_1}\cdots\sum_{k_n}\left(\prod_{k}n_k!/N!\right)$$

(一組の $k_1\cdots k_N$ に対し，これらを並べかえる独立な置換の数は $\dfrac{N!}{\prod\limits_{k}n_k!}$ である)

となることに注意すると，上の和は結局 Fermi 系と同じことになり，(29) が成り立つ。

5. まず3次元では $\sum\limits_{k}=\sum\limits_{k_x}\sum\limits_{k_y}\sum\limits_{k_z}$ で $k_\alpha=\dfrac{2\pi}{L}n\ (n=0,\pm1,\pm2,\cdots,\ \alpha=x,y,z)$ であるから，L が十分大きいときは $\sum\limits_{k_\alpha}=\dfrac{L}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dk_\alpha$ と積分に直すことができる。つまり

$$\sum_{k}=\frac{L^3}{8\pi^3}\iiint dk_x dk_y dk_z$$

である。この積分を $\epsilon(\boldsymbol{k})$ についての積分に直すと,

$$\iiint dk_x dk_y dk_z=\int_0^{\infty}4\pi k^2 dk$$

であり

$$\epsilon(k)=\frac{\hbar^2}{2m}k^2$$

より

$$d\epsilon(k)=\frac{\hbar^2}{m}k\,dk$$

なので

$$\sum_{k}=\frac{\Omega}{8\pi^3}\,\frac{m}{\hbar^2}\cdot4\pi\int k\,dk=\frac{\Omega}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\int\sqrt{\epsilon}\,d\epsilon$$

となるので，状態密度は

$$\rho(\epsilon)=\frac{\Omega}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\sqrt{\epsilon}$$

で与えられる。

同様にして2次元では

$$\sum_{k}=\frac{L^2}{4\pi^2}\iint dk_x dk_y=\frac{S}{4\pi^2}\int 2\pi k\,dk \qquad (S=L^2\ \text{は系の面積})$$

$$=\frac{S}{2\pi}\,\frac{m}{\hbar^2}\int d\epsilon$$

となり，$\rho(\epsilon)=\dfrac{S}{2\pi}\,\dfrac{m}{\hbar^2}$ と，ϵ によらない定数になる。

6. (53) で

$$\frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)}-1}=\sum_{n=1}^{\infty}e^{-n\beta(\epsilon-\mu)}$$

と展開すると，(53) は

$$N_1=\sum_{n=1}^{\infty}e^{n\beta\mu}\int_0^{\infty}\rho(\epsilon)\,e^{-n\beta\epsilon}d\epsilon$$

となる。ここで $\rho(\epsilon)\propto\epsilon^l\,(l\geq 0)$ とすれば

$$\int_0^\infty \rho(\epsilon)\,e^{-n\beta\epsilon}d\epsilon\propto\int_0^\infty \epsilon^l e^{-n\beta\epsilon}d\epsilon=\frac{1}{(n\beta)^{l+1}}\int_0^\infty x^l e^{-x}dx\propto\frac{1}{(n\beta)^{l+1}}$$

となるので,

$$N_1\propto\sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{n\beta\mu}}{n^{l+1}}$$

となる。この級数は $\mu<0$ のときはたしかに収束するが, $\mu\to 0$ では $l>0$ のとき収束し, $l=0$ では発散する。後者の場合は $N=N_1$ の解が, 常にある $\mu<0$ に対して存在するので Bose 凝縮はおきない。$l>0$ のときは N_1 にある最大値があり, N がそれを越すと Bose 凝縮がおきる。2 次元の自由粒子では, 前題で示したように $l=0$ なので Bose 凝縮はおきない。

7. 問題のようなエネルギー・スペクトルの粒子系での状態密度は

$$\rho(\epsilon)=\begin{cases}C\sqrt{\epsilon-\varDelta} & (\epsilon\geq\varDelta)\\ 0 & (\epsilon<\varDelta)\end{cases}\qquad\left[C=\frac{\Omega}{4\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}\right]$$

であることが問題 5 よりすぐにわかる。したがって励起粒子の数は

$$N_1=C\sum_{n=1}^{\infty}e^{n\beta(\mu-\varDelta)}\frac{1}{(n\beta)^{3/2}}\int_0^\infty x^{1/2}e^{-x}dx\qquad(\text{問題 6 参照})$$

$$=\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2}\Omega\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^{3/2}}e^{n\beta(\mu-\varDelta)}$$

となり, $N=\left(\dfrac{2\pi mkT_\lambda}{h^2}\right)^{3/2}\Omega\displaystyle\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^{3/2}}e^{-n\varDelta/kT_\lambda}$ できまる温度 T_λ で Bose 凝縮がおきることがわかる。以下では低温 $T\ll T_\lambda$ について議論する。

内部エネルギー U は

$$U=\sum_p\epsilon(p)\frac{1}{e^{\beta\{\epsilon(p)+\varDelta\}}-1}=\sum_p\left(\varDelta+\frac{p^2}{2m}\right)\frac{1}{e^{\beta(p^2/2m+\varDelta)}-1}$$

$$=\varDelta N_1+C\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(n\beta)^{5/2}}\int_0^\infty x^{3/2}e^{-x}dx\,e^{-n\beta\varDelta}$$

$$=\varDelta\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{-n\varDelta/kT}}{n^{3/2}}\Omega+\frac{3}{2}kT\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{-n\varDelta/kT}}{n^{5/2}}\Omega$$

で与えられ, $T\ll\varDelta$ では $T^{3/2}e^{-\varDelta/kT}$ が主な項になる。

比熱 C は $\partial U/\partial T$ で与えられ, $T\ll\varDelta$ では $T^{1/2}e^{-\varDelta/kT}$ に比例する。

8. 一つのスピン, たとえば S^x に対して

$$[\boldsymbol{S}^2,S^x]=[(S^x)^2+(S^y)^2+(S^z)^2,S^x]=[(S^y)^2,S^x]+[(S^z)^2,S^x]$$
$$=S^y[S^y,S^x]+[S^y,S^x]S^y+S^z[S^z,S^x]+[S^z,S^x]S^z$$

となるので (74) を用いて

$$[\boldsymbol{S}^2,S^x]=S^y(-iS^z)+(-iS^z)S^y+S^z(iS^y)+(iS^y)S^z=0$$

となることが示される。S^y, S^z に対しても同じである。

9. (90), (91) を用いて $H|\boldsymbol{k}\rangle$ を計算する。

$$H|\boldsymbol{k}\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_j}H|j\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_j}\Big\{(E_0+2JzS)|j\rangle-2JS\sum_{\langle l\rangle_j}|l\rangle\Big\}$$

であるが，これの第二項の和は

$$\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j\sum_{<l>_j}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R}_j}|l\rangle=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_l\sum_{<j>_l}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{R}_l+\boldsymbol{\rho})}|l\rangle=\gamma(\boldsymbol{k})|\boldsymbol{k}\rangle$$

となるので $H|\boldsymbol{k}\rangle=(E_0+\epsilon_{\boldsymbol{k}})|\boldsymbol{k}\rangle$ で，$\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ は(92)で与えられることが示される。

10. $S_{\rm tot}{}^z|j\rangle=\sum_l S_l{}^z|j\rangle=\{(N-1)S+(S-1)\}|j\rangle=(NS-1)|j\rangle$ であるから，(95)の第二式はすぐに証明できる。第一式については

$$\boldsymbol{S}_{\rm tot}{}^2=\sum_l\boldsymbol{S}_l{}^2+\sum_{l\neq l'}\sum\boldsymbol{S}_l\cdot\boldsymbol{S}_{l'}$$

を用い，

$$\sum_l\boldsymbol{S}_l{}^2|j\rangle=NS(S+1)|j\rangle \qquad ①$$

$$\begin{aligned}\sum_{l\neq l'}\sum\boldsymbol{S}_l\cdot\boldsymbol{S}_{l'}|j\rangle&=\sum_{l\neq l'}\sum\left\{S_l{}^zS_{l'}{}^z+\frac{1}{2}\left(S_l{}^+S_{l'}{}^-+S_l{}^-S_{l'}{}^+\right)\right\}|j\rangle\\&=(N-1)(N-2)S^2|j\rangle+2(N-1)S(S-1)|j\rangle\\&\quad+\frac{1}{2}(\sqrt{2S})^2\sum_{l\neq j}|l\rangle\times 2\end{aligned} \qquad ②$$

(第一項の和を j を含まないものと，j を含むものに分け，第二項の和の中で残るものは $S_l{}^-S_j{}^+$ のみであり，$S^+|S-1\rangle=\sqrt{2S}|S\rangle$，$S^-|S\rangle=\sqrt{2S}|S-1\rangle$ を用いた) を使えば，$\boldsymbol{S}_{\rm tot}{}^2|\boldsymbol{k}=0\rangle=\alpha|\boldsymbol{k}=0\rangle$ となり，α に対する寄与は

①からは	$NS(S+1)=NS^2+NS$
②の第一項からは	$(N-1)(N-2)S^2$
②の第二項からは	$2(N-1)(S^2-S)$
②の第三項からは	$2S(N-1)$

となり，これらを加え合わせて(95)が証明される。

演習問題 2.

1. (1·30)の元の定義(1·24)を用いれば

$$\begin{aligned}&(k_1'\cdots k_N'|F|k_1\cdots k_N)\\&=\frac{1}{N!}\sum_P\sum_{P'}(-1)^{\epsilon_P+\epsilon_{P'}}\int\cdots\int P[\varphi_{k_1'}{}^*(x_1)\cdots\varphi_{k_N'}{}^*(x_N)]\sum_{j=1}^N f(x_j)\\&\quad\times P'[\varphi_{k_1}(x_1)\cdots\varphi_{k_N}(x_N)]dx_1\cdots dx_N\end{aligned}$$

となるが，$P'=P''P$ と書き $P\sum_j f(x_j)=\sum_j f(x_j)$ であることを用いれば，上式は

$$\frac{1}{N!}\sum_P\sum_{P''}(-1)^{\epsilon_{P''}}\int\cdots\int\varphi_{k_1'}{}^*(x_1)\cdots\varphi_{k_N'}{}^*(x_N)\sum_{j=1}^N f(x_j)\times P''[\varphi_{k_1}(x_1)\cdots\varphi_{k_N}(x_N)]dx_1\cdots dx_N$$

となる。和の中は P によらないから $\sum_P$ は $N!$ を与える。いま $P''^{-1}(k_1\cdots k_N)=k_1''\cdots k_N''$ とすると $P''[\varphi_{k_1}(x_1)\cdots\varphi_{k_N}(x_N)]=\varphi_{k_1''}(x_1)\cdots\varphi_{k_N''}(x_N)$ であるから，

$$\begin{aligned}\text{上式}&=\sum_{P''}(-1)^{\epsilon_{P''}}\int\cdots\int\varphi_{k_1'}{}^*(x_1)\cdots\varphi_{k_N'}{}^*(x_N)\sum_{j=1}^N f(x_j)\\&\qquad\times\varphi_{k_1''}(x_1)\cdots\varphi_{k_N''}(x_N)dx_1\cdots dx_N\\&=\sum_{j=1}^N\sum_{P''}(-1)^{\epsilon_{P''}}(k_1'|k_1'')\cdots(k_j'|f|k_j'')\cdots(k_N'|k_N'')\end{aligned}$$

したがって2個以上の k_i が k_i'' と異なるときは $(k_i'|k_i'')$ のうち少なくも1個の k_i' と k_i'' とは異なり上式は0になる。$k_i \neq k_i'$ で他の $k_l = k_l'$ のときは，上の和のうち $j=i$, $P''=1$ のみが残り，$(k_i'|f|k_i)$ になる。すべての $k_i = k_i'$ のときは $P''=1$ のみが残り $\sum_{j=1}^{N}(k_j|f|k_j)$ に等しくなる。

2. (1·25)で二つの集合 $n=\{k_1\cdots k_N\}$ と $n'=\{k_1'\cdots k_N'\}$ が等しいことは，n 個の要素が全体として一致すればよく，また任意の二つの k を入れかえると符号が変わるから

$$\delta_{nn'}=\det(\delta_{k_i,k_j'})$$

を意味する。$k_1<k_2<\cdots<k_N$, $k_1'<k_2'<\cdots<k_N'$ というような順序づけをしておくと，これは $\prod_{j=1}^{N}\delta_{k_j,k_j'}$ に等しい。したがって本文の Δ_{ij} の定義と比べれば，問題のようになることが示される。

3. どちらの粒子系でも $N=\sum a_k^\dagger a_k$ と $a_1^\dagger a_2$ との交換関係は

$$[a_1^\dagger a_2,\ N]=a_1^\dagger[a_2,\ N]+[a_1^\dagger,\ N]a_2=a_1^\dagger a_2-a_1^\dagger a_2=0$$

であり，同様に $[a_1^\dagger a_2^\dagger a_3 a_4,\ N]=0$ になることはすぐにわかる。

また $N=\int\psi^\dagger(x)\psi(x)dx$ と $\psi^\dagger(x)$, $\psi(x)$ との交換関係は

$$[\psi(y),\ N]=\psi(y),\qquad [\psi^\dagger(y),\ N]=-\psi^\dagger(y)$$

となることより，(22)の H は N と可換なことはすぐにわかる。

4. (16)より

$$\langle n|m\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!\,m!}}\langle 0|(a)^n(a^\dagger)^m|0\rangle$$

であるが

$$a(a^\dagger)^m=[a,\ a^\dagger](a^\dagger)^{m-1}+a^\dagger a(a^\dagger)^{m-1}=(a^\dagger)^{m-1}+a^\dagger a(a^\dagger)^{m-1}$$

をくり返し用いれば

$$a(a^\dagger)^m=m(a^\dagger)^{m-1}+(a^\dagger)^m a$$

となる。$a|0\rangle=0$ であるから，これをくり返し用いると，上式は

$n>m$ のとき　$\dfrac{1}{\sqrt{n!\,m!}}\langle 0|a^{n-m}m!|0\rangle=0$

$n<m$ のとき　$\dfrac{1}{\sqrt{n!\,m!}}\langle 0|m(m-1)\cdots(m-n)(a^\dagger)^{m-n}|0\rangle=0$　　$(\langle 0|a^\dagger=0)$

となり，$n\neq m$ のときは直交している。

$n=m$ のとき，上式$=\dfrac{1}{m!}m!\langle 0|0\rangle=1$ となることもすぐにわかる。

演習問題 3.

1. Φ^* についての変分をとると

$$\delta W=\frac{1}{(\Phi,\ \Phi)^2}[\delta(\Phi,\ H\Phi)\cdot(\Phi,\ \Phi)-(\Phi,\ H\Phi)\cdot\delta(\Phi,\ \Phi)]$$

$$=\frac{1}{(\Phi,\ \Phi)^2}[(\Phi,\ \Phi)H\Phi-(\Phi,\ H\Phi)\Phi]\delta\Phi^*$$

となる。したがって $\delta W=0$ より

$$H\Phi=\frac{(\Phi,\ H\Phi)}{(\Phi,\ \Phi)}\Phi=W\Phi$$

となり，Φ は H の固有関数でその固有値は W で与えられる。したがって W を最小にする Φ は基底状態の波動関数である。

2. まず $g(x,y)=0$ のとき $f(x,y)$ が極値をとる条件は

$$\frac{\partial f}{\partial x}+\frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx}=0$$

で与えられる。ただし $\dfrac{dy}{dx}$ は $g(x,y)=0$ より

$$\frac{\partial g}{\partial x}+\frac{\partial g}{\partial y}\frac{dy}{dx}=0$$

よりきめられる。つまり，

$$\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\partial g}{\partial y}-\frac{\partial f}{\partial y}\frac{\partial g}{\partial x}=0$$

である。一方問題に与えた条件は

$$\frac{\partial f}{\partial x}-\lambda\frac{\partial g}{\partial x}=0,\qquad \frac{\partial f}{\partial y}-\lambda\frac{\partial g}{\partial y}=0$$

となり，これから λ を消去すれば上の条件と全く同じになる。

3. (30) に (33) を代入し，$V_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}$ として (36) を用いると

$$W_0=\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}\left(1-\frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}}}{E_{\boldsymbol{k}}}\right)-\frac{V}{4}\sum_{\boldsymbol{k}}{}'\sum_{\boldsymbol{k}'}{}'\frac{\varDelta_0}{E_{\boldsymbol{k}}}\frac{\varDelta_0}{E_{\boldsymbol{k}'}}$$

さらに (37) を用い，$\displaystyle\sum_{\boldsymbol{k}}\epsilon_{\boldsymbol{k}}=\rho(0)\int_{-\omega_{\mathrm{D}}}^{\omega_{\mathrm{D}}}\epsilon d\epsilon=0$ を使えば

$$W_0=-\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{\epsilon_{\boldsymbol{k}}{}^2}{E_{\boldsymbol{k}}}-\frac{\varDelta_0{}^2}{V}=-\sum_{\boldsymbol{k}}E_{\boldsymbol{k}}+\frac{\varDelta_0{}^2}{V}$$

第一の和を計算すると

$$\sum_{\boldsymbol{k}}E_{\boldsymbol{k}}=2\rho(0)\int_0^{\omega_{\mathrm{D}}}\sqrt{\epsilon^2+\varDelta_0{}^2}\,d\epsilon=\rho(0)\,\omega_{\mathrm{D}}\sqrt{\omega_{\mathrm{D}}{}^2+\varDelta_0{}^2}+\rho(0)\,\varDelta_0{}^2\sinh^{-1}\frac{\omega_{\mathrm{D}}}{\varDelta_0}$$

となるが，(38) を用いて

$$\sum_{\boldsymbol{k}}E_{\boldsymbol{k}}=\rho(0)\,\omega_{\mathrm{D}}{}^2\coth\left(\frac{1}{\rho(0)V}\right)+\frac{\varDelta_0{}^2}{V}$$

となる。つまり

$$W_0=-\rho(0)\,\omega_{\mathrm{D}}{}^2\coth\left(\frac{1}{\rho(0)V}\right)$$

常伝導状態のエネルギー $W_0{}^0$ は

$$W_0{}^0=2\sum_{\epsilon_{\boldsymbol{k}}<0}\epsilon_{\boldsymbol{k}}=-\rho(0)\,\omega_{\mathrm{D}}{}^2$$

で与えられるので，

$$W_0=W_0{}^0-\rho(0)\,\omega_{\mathrm{D}}{}^2\left\{\coth\left(\frac{1}{\rho(0)V}\right)-1\right\}=W_0{}^0-2\rho(0)\,\omega_{\mathrm{D}}{}^2\frac{1}{\exp\left(\dfrac{2}{\rho(0)V}\right)-1}$$

4. $\Psi_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}}=a_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^{\dagger}a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^{\dagger}\prod_{\boldsymbol{k}_1\neq\boldsymbol{k}}(u_{\boldsymbol{k}_1}+v_{\boldsymbol{k}_1}a_{\boldsymbol{k}_1\uparrow}{}^{\dagger}a_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow}{}^{\dagger})|0\rangle$ は Φ と直交していない。直交する波動関数は

$$\Psi_{\boldsymbol{k}}=(v_{\boldsymbol{k}}-u_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^{\dagger}a_{-\boldsymbol{k}\downarrow})\prod_{\boldsymbol{k}_1\neq\boldsymbol{k}}(u_{\boldsymbol{k}_1}+v_{\boldsymbol{k}_1}a_{\boldsymbol{k}_1\uparrow}{}^{\dagger}a_{-\boldsymbol{k}_1\downarrow}{}^{\dagger})|0\rangle$$

という形でつくられる。この状態でのエネルギー $W_{\boldsymbol{k}}$ を計算するため，いろいろな量の期待値を求める。

$$(\Psi_{\boldsymbol{k}},\ a_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}\uparrow}\Psi_{\boldsymbol{k}})=(\Psi_{\boldsymbol{k}},\ a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^{\dagger}a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\Psi_{\boldsymbol{k}})=u_{\boldsymbol{k}}{}^2$$
$$(\Psi_{\boldsymbol{k}},\ a_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^{\dagger}a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^{\dagger}\Psi_{\boldsymbol{k}})=(\Psi_{\boldsymbol{k}},\ a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}a_{\boldsymbol{k}\uparrow}\Psi_{\boldsymbol{k}})=-(uv)_{\boldsymbol{k}}$$

その他の量の期待値は $\boldsymbol{\Phi}$ と同じである。したがって

$$W_{\boldsymbol{k}}=W_0+2(u_{\boldsymbol{k}}{}^2-v_{\boldsymbol{k}}{}^2)\epsilon_{\boldsymbol{k}}+2(uv)_{\boldsymbol{k}}V\sum_{\boldsymbol{k}'}(uv)_{\boldsymbol{k}'}$$

となり，これは(41)で $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}'$ とおいたものと同じである。

演 習 問 題 4.

1. 各軌道に逆向きスピンをもった 2 粒子がある場合の $\rho(x,x')$ は，

$$\rho(x,x')=\sum_{i=1}^{N/2}\varphi_{\boldsymbol{k}_i}{}^*(\boldsymbol{r})\varphi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r}')\{\alpha(\zeta)\alpha(\zeta')+\beta(\zeta)\beta(\zeta')\}$$

と表わされる。ただし α,β はそれぞれ上向き，下向きのスピン状態を表わす関数であり，スピン変数を ζ と書いた。これを用いて(9)，(10)の v_{eff} と A を計算すると，

$$v_{\text{eff}}(x)=2\int v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\sum_{i=1}^{N/2}|\varphi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r}')|^2d^3\boldsymbol{r}'$$

$$\begin{aligned}A\varphi_{\boldsymbol{k}_j}(\boldsymbol{r})\begin{Bmatrix}\alpha(\zeta)\\\beta(\zeta)\end{Bmatrix}&=\int v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi_{\boldsymbol{k}_j}(\boldsymbol{r}')\begin{Bmatrix}\alpha(\zeta')\\\beta(\zeta')\end{Bmatrix}\sum_{i=1}^{N/2}\varphi_{\boldsymbol{k}_i}{}^*(\boldsymbol{r}')\varphi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r})\\&\quad\times\{\alpha(\zeta')\alpha(\zeta)+\beta(\zeta')\beta(\zeta)\}dx'\\&=\sum_{i=1}^{N/2}\int v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi_{\boldsymbol{k}_i}{}^*(\boldsymbol{r}')\varphi_{\boldsymbol{k}_j}(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}'\varphi_{\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r})\begin{Bmatrix}\alpha(\zeta)\\\beta(\zeta)\end{Bmatrix}\end{aligned}$$

となるので，問題の式がすぐに求められる。

2. (62)の B_S の定義と $\coth x\sim\dfrac{1}{x}\left(1+\dfrac{1}{3}x^2-\dfrac{1}{45}x^4+\cdots\right)$ $(x\ll1)$ を用いれば

$$\begin{aligned}B_S(x)&\sim\frac{2S+1}{2S}\frac{2S}{2S+1}\frac{1}{x}\left\{1+\frac{1}{3}\left(\frac{2S+1}{2S}x\right)^2-\frac{1}{45}\left(\frac{2S+1}{2S}x\right)^4+\cdots\right\}\\&\quad-\frac{1}{2S}\frac{2S}{x}\left\{1+\frac{1}{3}\left(\frac{x}{2S}\right)^2-\frac{1}{45}\left(\frac{x}{2S}\right)^4+\cdots\right\}\\&=\frac{1}{3}\left\{\left(\frac{2S+1}{2S}\right)^2-\left(\frac{1}{2S}\right)^2\right\}x-\frac{1}{45}\left\{\left(\frac{2S+1}{2S}\right)^4-\left(\frac{1}{2S}\right)^4\right\}x^3\\&=\frac{1}{3}\frac{4S(S+1)}{(2S)^2}x-\frac{1}{45}\frac{8S\{2S(S+1)^2+S+1\}}{(2S)^4}x^3\\&=\frac{S+1}{3S}x-\frac{2S(S+1)^2+S+1}{90S^3}x^3\end{aligned}$$

3. (74)より $\dfrac{\partial u_{\boldsymbol{k}}}{\partial v_{\boldsymbol{k}}}=\dfrac{v_{\boldsymbol{k}}}{u_{\boldsymbol{k}}}$ であるから

$$\frac{\partial}{\partial v_{\boldsymbol{k}}}(uv)_{\boldsymbol{k}}=\frac{v_{\boldsymbol{k}}{}^2}{u_{\boldsymbol{k}}}+u_{\boldsymbol{k}}=\frac{1}{u_{\boldsymbol{k}}}(u_{\boldsymbol{k}}{}^2+v_{\boldsymbol{k}}{}^2)$$

に注意して，(75 a)を $v_{\boldsymbol{k}}$ で微分して 0 とおく。すると

$$\frac{\partial U_0'}{\partial v_{\boldsymbol{k}}}=2v_{\boldsymbol{k}}(\epsilon_{\boldsymbol{k}}+NV_{\boldsymbol{k}})-NV_{\boldsymbol{k}}\frac{1}{u_{\boldsymbol{k}}}(u_{\boldsymbol{k}}^2+v_{\boldsymbol{k}}^2)$$

$$+2v_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'}(V_0+V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'})v_{\boldsymbol{k}'}{}^2-2v_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'}(V_0+V_{\boldsymbol{k}}+V_{\boldsymbol{k}'})v_{\boldsymbol{k}'}{}^2$$

$$+\frac{1}{u_{\boldsymbol{k}}}(u_{\boldsymbol{k}}^2+v_{\boldsymbol{k}}^2)\sum_{\boldsymbol{k}'}V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}(uv)_{\boldsymbol{k}'}+\frac{1}{u_{\boldsymbol{k}}}(u_{\boldsymbol{k}}^2+v_{\boldsymbol{k}}^2)V_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'}v_{\boldsymbol{k}'}{}^2+2v_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'}V_{\boldsymbol{k}'}(uv)_{\boldsymbol{k}'}$$

$$=2v_{\boldsymbol{k}}\{\epsilon_{\boldsymbol{k}}+NV_{\boldsymbol{k}}+\sum_{\boldsymbol{k}'}(V_0+V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'})v_{\boldsymbol{k}'}{}^2-\sum_{\boldsymbol{k}'}(V_0+V_{\boldsymbol{k}}+V_{\boldsymbol{k}'})v_{\boldsymbol{k}'}{}^2+\sum_{\boldsymbol{k}'}V_{\boldsymbol{k}'}(uv)_{\boldsymbol{k}'}\}$$

$$+\frac{u_{\boldsymbol{k}}^2+v_{\boldsymbol{k}}^2}{u_{\boldsymbol{k}}}\{-NV_{\boldsymbol{k}}+\sum_{\boldsymbol{k}'}V_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'}(uv)_{\boldsymbol{k}'}+V_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'}v_{\boldsymbol{k}'}{}^2\}$$

これは(77)式と比べれば $-\dfrac{2}{u_{\boldsymbol{k}}}A_{\boldsymbol{k}}$ に等しいことがわかり，$\dfrac{\partial U_0'}{\partial v_{\boldsymbol{k}}}=0$ は $A_{\boldsymbol{k}}=0$ と同等である。

4. $U=\exp S$, $U^{-1}=\exp(-S)$ とおくと

$$U\alpha U^{-1}=\alpha+[S,\ \alpha]+\frac{1}{2!}[S[S,\ \alpha]]+\frac{1}{3!}[S[S[S,\ \alpha]]]+\cdots$$

であるから，これが(37)，$u_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}+v_{\boldsymbol{k}}\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger$ に等しくなればよい。それには $[S,\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}]=\theta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger$, $[S,\ \alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger]=\theta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}$ になるようにとってみる。つまり

$$S=-\sum_{\boldsymbol{k}}\theta_{\boldsymbol{k}}(\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger-\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow})$$

ととると，

$$[S,\ \alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}]=\theta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger,\qquad [S[S,\ \alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}]]=-\theta_{\boldsymbol{k}}{}^2\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow},\qquad \cdots$$

となるから

$$U\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}U^{-1}=\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}+\theta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger-\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}{}^2}{2!}\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}-\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}{}^3}{3!}\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger+\cdots$$
$$=\cos\theta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}+\sin\theta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger$$

となり，$u_{\boldsymbol{k}}=\cos\theta_{\boldsymbol{k}}$, $v_{\boldsymbol{k}}=\sin\theta_{\boldsymbol{k}}$ とおけば(37)に一致する。

5. 前問と同様に

$$U=\exp S,\qquad S=\sum_{\boldsymbol{k}}\theta_{\boldsymbol{k}}(\alpha_{\boldsymbol{k}}{}^\dagger\alpha_{-\boldsymbol{k}}{}^\dagger-\alpha_{-\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}})$$

とおくと

$$[S,\ \alpha_{\boldsymbol{k}}]=-\theta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{-\boldsymbol{k}}{}^\dagger,\qquad [S[S,\ \alpha_{\boldsymbol{k}}]]=\theta_{\boldsymbol{k}}{}^2\alpha_{\boldsymbol{k}},\qquad \cdots$$

なので

$$U\alpha_{\boldsymbol{k}}U^{-1}=\alpha_{\boldsymbol{k}}-\theta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{-\boldsymbol{k}}{}^\dagger+\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}{}^2}{2!}\alpha_{\boldsymbol{k}}-\frac{\theta_{\boldsymbol{k}}{}^3}{3!}\alpha_{-\boldsymbol{k}}{}^\dagger+\cdots$$
$$=\cosh\theta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{\boldsymbol{k}}-\sinh\theta_{\boldsymbol{k}}\alpha_{-\boldsymbol{k}}{}^\dagger$$

となり，(73)が得られる。

6. $N=\sum_{\boldsymbol{k}}(a_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}\uparrow}+a_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger a_{-\boldsymbol{k}\downarrow})$ と書き，(37)を用いると

$$N=\sum_{\boldsymbol{k}}\{2v_{\boldsymbol{k}}{}^2+(u_{\boldsymbol{k}}{}^2-v_{\boldsymbol{k}}{}^2)(\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}+\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow})+2(uv)_{\boldsymbol{k}}(\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger+\alpha_{-\boldsymbol{k}\downarrow}\alpha_{\boldsymbol{k}\uparrow})\}$$

となるので

$$\langle N\rangle=2\sum_{\boldsymbol{k}}v_{\boldsymbol{k}}{}^2$$

になることはすぐにわかる。$\langle N^2\rangle$ は

$$N|0\rangle=\{2\sum_k v_k{}^2+2\sum_k (uv)_k\alpha_{k\uparrow}{}^\dagger\alpha_{-k\downarrow}{}^\dagger\}|0\rangle$$

だから

$$\langle 0|N^2|0\rangle=(2\sum_k v_k{}^2)^2+4\sum_k (uv)_k{}^2$$

となる。つまり

$$\langle N^2\rangle-\langle N\rangle^2=4\sum_k (uv)_k{}^2=\sum_k\left(1-\frac{\epsilon_k{}^2}{E_k{}^2}\right)=\Delta_0{}^2\sum_k\frac{1}{E_k{}^2}=\pi\rho(0)\Delta_0$$

できわめて小さい。

演習問題 5.

1. 臨界点は $\left(\dfrac{\partial p}{\partial\Omega}\right)_T=0$, $\left(\dfrac{\partial^2 p}{\partial\Omega^2}\right)_T=0$ で与えられる（等温線は低温では極大と極小を示し，臨界温度はこの極大，極小が一致する温度であり，これより高温では等温線は単調減少になる）。$p=\dfrac{Nk_BT}{\Omega-b}-\dfrac{a}{\Omega^2}$ より

$$\frac{Nk_BT}{(\Omega-b)^2}=\frac{2a}{\Omega^2},\qquad \frac{2Nk_BT}{(\Omega-b)^3}=\frac{6a}{\Omega^3}$$

となり，これを解いて

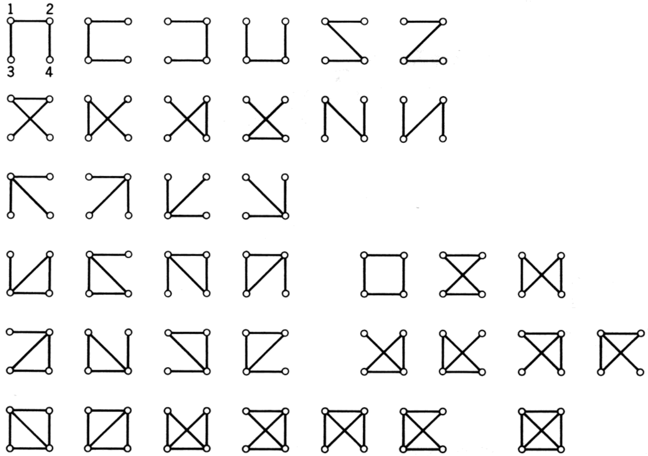
$$\Omega_c=3b,\qquad p_c=\frac{a}{27b^2},\qquad T_c=\frac{8a}{27bNk_B}$$

を得る。ついでに

$$\frac{Nk_BT_c}{p_c\Omega_c}=\frac{8}{3}$$

となる。この右辺の値を **Kamerlingh-Onnes**（カメリン-オンネス）**の定数**という。

2. 4個の分子を結ぶあらゆる方法を考えればよい。結果は下図。



3. (15)の最初の数項を書くと

$$\frac{N}{\Omega}=z+2b_2z^2+3b_3z^3+\cdots$$

N/Ω が小さいとして逐次近似で z を求めると

$$\begin{aligned}z&=\frac{N}{\Omega}-2b_2z^2-3b_3z^3-\cdots\\&\sim\frac{N}{\Omega}-2b_2\left\{\frac{N}{\Omega}-2b_2\left(\frac{N}{\Omega}\right)^2\right\}^2-3b_3\left(\frac{N}{\Omega}\right)^3-\cdots\\&\sim\frac{N}{\Omega}-2b_2\left(\frac{N}{\Omega}\right)^2+(8b_2{}^2-3b_3)\left(\frac{N}{\Omega}\right)^3+O\left(\left(\frac{N}{\Omega}\right)^4\right)\end{aligned}$$

これを(14)に代入して

$$\begin{aligned}\frac{p}{k_{\mathrm{B}}T}&=z+b_2z^2+b_3z^3+\cdots\\&\sim\frac{N}{\Omega}-2b_2\left(\frac{N}{\Omega}\right)^2+(8b_2{}^2-3b_3)\left(\frac{N}{\Omega}\right)^3\\&\quad+b_2\left\{\left(\frac{N}{\Omega}\right)^2-4b_2\left(\frac{N}{\Omega}\right)^3\right\}+b_3\left(\frac{N}{\Omega}\right)^3\\&=\frac{N}{\Omega}\left\{1-b_2\frac{N}{\Omega}+(4b_2{}^2-2b_3)\left(\frac{N}{\Omega}\right)^2+O\left(\left(\frac{N}{\Omega}\right)^3\right)\right\}\end{aligned}$$

したがって第三ビリアル係数 $C(T)$ は

$$C(T)=4b_2{}^2-2b_3$$

(10)の b_3 の積分のうちたとえば $\frac{1}{\Omega}\iiint f_{12}f_{13}d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2d^3\boldsymbol{r}_3$ はまず $\boldsymbol{r}_2$ と $\boldsymbol{r}_3$ について積分すると $(2b_2)^2$ になり，$d^3\boldsymbol{r}_1$ は Ω を与える。つまり

$$b_3=\frac{1}{6}(2b_2)^2\times3+\beta_3,\qquad \beta_3=\frac{1}{3!\,\Omega}\iiint f_{12}f_{13}f_{23}d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2d^3\boldsymbol{r}_3$$

と書ける。すると

$$C(T)=-2\beta_3$$

になることがわかる。この β_3 を**既約積分**とよぶ。

4. $\mathrm{T}[AB]=AB\,\theta(t_A-t_B)+BA\,\theta(t_B-t_A)$ であるが，$[A,B]=0$ であるから $\mathrm{T}[AB]=AB$. 一方 $\mathrm{N}[AB]=AB$ または BA であるが，$[A,B]=0$ であるから $\mathrm{N}[AB]=0$. ゆえに $\dot{A}\dot{B}=0$.

とくに $[\psi(x),\psi(y)]=[\psi^\dagger(x),\psi^\dagger(y)]=0$ であるから，$\dot\psi(x)\dot\psi(y)=\dot\psi^\dagger(x)\dot\psi^\dagger(y)=0$

$$\begin{aligned}\dot\psi(x)\dot\psi^\dagger(y)&=\{\psi(x)\psi^\dagger(y)\theta(t_x-t_y)-\psi^\dagger(y)\psi(x)\theta(t_y-t_x)\}-\psi^\dagger(y)\psi(x)\\&=\{\psi(x)\psi^\dagger(y)-\psi^\dagger(y)\psi(x)\}\theta(t_x-t_y)\end{aligned}$$

ここで

$$\psi(x)=\frac{1}{\sqrt{\Omega}}\sum_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-i\omega_{\boldsymbol{k}}t_x}$$

を用いると

$$[\psi(x),\psi^\dagger(y)]=\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}(t_x-t_y)}$$

であるから，

$$\dot\psi(x)\dot\psi^\dagger(y)=\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}(t_x-t_y)}\theta(t_x-t_y)$$

5. $[H_0, a_{\boldsymbol{k}}]=-\epsilon_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}}$ より

$$a_{\boldsymbol{k}}(\tau)=e^{\tau H_0}a_{\boldsymbol{k}}e^{-\tau H_0}=a_{\boldsymbol{k}}-\tau\epsilon_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}}+\frac{1}{2!}(\tau\epsilon_{\boldsymbol{k}})^2a_{\boldsymbol{k}}-\cdots$$
$$=a_{\boldsymbol{k}}e^{-\tau\epsilon_{\boldsymbol{k}}}$$
$$a_{\boldsymbol{k}}^\dagger(\tau)=a_{\boldsymbol{k}}^\dagger+\tau\epsilon_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}}^\dagger+\frac{1}{2!}(\tau\epsilon_{\boldsymbol{k}})^2a_{\boldsymbol{k}}^\dagger+\cdots$$
$$=a_{\boldsymbol{k}}^\dagger e^{\tau\epsilon_{\boldsymbol{k}}}$$

演習問題 6.

1. (8 a)の $G_{AB}{}^{\mathrm{R}}(t,t')$ を t について微分すると,

$$\frac{\partial A(t)}{\partial t}=\frac{i}{\hbar}[H,\ A(t)],\qquad \frac{\partial\theta(t-t')}{\partial t}=\delta(t-t')$$

に注意すれば

$$i\frac{\partial}{\partial t}G_{AB}{}^{\mathrm{R}}(t-t')=-\frac{(-i)}{\hbar}\theta(t-t')\langle[H,\ A(t)]B(t')]_{\mp}\rangle$$
$$+\langle[A(t),\ B(t)]_{\mp}\rangle\delta(t-t')$$

つまり

$$i\frac{\partial}{\partial t}G_{AB}{}^{\mathrm{R}}(t-t')-\frac{1}{\hbar}\theta(t-t')\langle[[H,\ A(t)]B(t')]_{\mp}\rangle=\langle[A,\ B]_{\mp}\rangle\delta(t-t')$$

となる。同様に $G_{AB}{}^{\mathrm{A}}$ についても

$$i\frac{\partial}{\partial t}G_{AB}{}^{\mathrm{A}}(t-t')+\frac{1}{\hbar}\theta(t'-t)\langle[[H,\ A(t)]B(t')]_{\mp}\rangle=\langle[A,\ B]_{\mp}\rangle\delta(t-t')$$

になる。

2. (13)式の $\mathscr{G}_{AB}(\tau,\tau')$ は

$$\mathscr{G}_{AB}(\tau,\tau')=-\langle A(\tau)\,(B\tau')\rangle\theta(\tau-\tau')\mp\langle B(\tau')\,A(\tau)\rangle\theta(\tau'-\tau)$$

であるから，これを τ で微分して

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\mathscr{G}_{AB}(\tau,\tau')=-\langle A(\tau)B(\tau')\mp B(\tau')A(\tau)\rangle\delta(\tau-\tau')-\langle \mathrm{T}_\tau\Big[\frac{\partial A(\tau)}{\partial\tau}B(\tau')\Big]\rangle$$

となるが，(11)式より $\dfrac{\partial A(\tau)}{\partial\tau}=\dfrac{1}{\hbar}[K,\ A(\tau)]$ だから，$\mathscr{G}_{AB}$ の満たす方程式は

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\mathscr{G}_{AB}(\tau,\tau')+\langle\mathrm{T}_\tau([K,\ A(\tau)]B(\tau'))\rangle=-\langle[A,\ B]_{\mp}\rangle\delta(\tau-\tau')$$

となる。

3. (15)式より $[\boldsymbol{P},\ a_{\boldsymbol{k}}]=-\hbar\boldsymbol{k}a_{\boldsymbol{k}}$ であるから

$$e^{-i\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}a_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{r}/\hbar}=a_{\boldsymbol{k}}-[\boldsymbol{P},\ a_{\boldsymbol{k}}]\frac{i\boldsymbol{r}}{\hbar}+\frac{1}{2!}[\boldsymbol{P},\ [\boldsymbol{P},\ a_{\boldsymbol{k}}]]\Big(\frac{i\boldsymbol{r}}{\hbar}\Big)^2+\cdots$$
$$=a_{\boldsymbol{k}}\Big\{1+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}+\frac{1}{2!}(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})^2+\cdots\Big\}$$
$$=a_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$

(17)式も同様に証明できる。

4. (8 a)の定義式より(Fermi 粒子系のみ)

$$G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}t\,;\boldsymbol{r}'t')=-i\theta(t-t')\sum_s\{\langle0|\psi(\boldsymbol{r},t)|s\rangle\langle s|\psi^\dagger(\boldsymbol{r}',t')|0\rangle$$
$$-\langle0|\psi^\dagger(\boldsymbol{r}',t')|s\rangle\langle s|\psi(\boldsymbol{r},t)|0\rangle\}$$

$$=-i\theta(t-t')\{\sum_s|\langle 0|\psi(0)|s\rangle|^2 e^{i\boldsymbol{k}_s\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-i(\epsilon_s+\mu)(t-t')/\hbar}$$

$$-\sum_{s'}|\langle s'|\psi^\dagger(0)|0\rangle|^2 e^{-i\boldsymbol{k}_{s'}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{i(\epsilon_{s'}-\mu)(t-t')/\hbar}\}$$

〔(20)式参照〕

$$=-i\theta(t-t')\int d^3\boldsymbol{k}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\{A(\boldsymbol{k},\omega)\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{-i\{\omega+(\mu/\hbar)\}(t-t')}$$

$$-B(\boldsymbol{k},\omega)\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{i\{\omega-(\mu/\hbar)\}(t-t')}\}$$

となるから，これの Fourier 変換

$$G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{k},\omega)=\int d^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\int d(t-t')G^{\mathrm{R}}(\boldsymbol{r}t\,;\boldsymbol{r}'t')\,e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}e^{i\omega(t-t')}$$

をつくれば，5章(88)式を用いて(24 a)が得られる。(24 b)も全く同様である。

5. $$\int_0^{\infty}\{A(\boldsymbol{k},\omega)+B(\boldsymbol{k},\omega)\}d\omega=(2\pi)^3\{\sum_s|\langle 0|\psi(0)|s\rangle|^2\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_s)$$

$$+\sum_{s'}|\langle s'|\psi(0)|0\rangle|^2\delta(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}_{s'})\}$$

〔(22)式の ϵ_s, $\epsilon_{s'}$ は両方とも正である〕。これを書き直して

$$\text{右辺}=\int d^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\{\sum_s\langle 0|\psi(0)|s\rangle\langle s|\psi^\dagger(0)|0\rangle e^{+i\boldsymbol{k}_s\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}$$

$$+\sum_{s'}\langle 0|\psi^\dagger(0)|s'\rangle\langle s'|\psi(0)|0\rangle e^{-i\boldsymbol{k}_s\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\}$$

$$=\int d^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\{\sum_s\langle 0|\psi(\boldsymbol{r})|s\rangle\langle s|\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')|0\rangle$$

$$+\sum_{s'}\langle 0|\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')|s'\rangle\langle s'|\psi(\boldsymbol{r})|0\rangle\}$$

$$=\int d^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\langle 0|\psi(\boldsymbol{r})\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')+\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})|0\rangle=1$$

6. (41)式の定義より

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\omega\rho(\boldsymbol{k},\omega)=\frac{(2\pi)^3}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}|\langle n|\psi(0)|m\rangle|^2(1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)})\delta(\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n))$$

$$=\frac{(2\pi)^3}{\Xi}\sum_n\sum_m\delta(\boldsymbol{k}-(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n))\{e^{-\beta K_n}\langle n|\psi(0)|m\rangle\langle m|\psi^\dagger(0)|n\rangle$$

$$\mp e^{-\beta K_m}\langle m|\psi^\dagger(0)|n\rangle\langle n|\psi(0)|m\rangle\}$$

$$=\int d^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\frac{1}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}$$

$$\times\{\langle n|\psi(0)|m\rangle\langle m|\psi^\dagger(0)|n\rangle e^{-i(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n)\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}$$

$$\mp\langle n|\psi^\dagger(0)|m\rangle\langle m|\psi(0)|n\rangle e^{i(\boldsymbol{k}_m-\boldsymbol{k}_n)\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\}$$

$$=\int d^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\langle\psi(\boldsymbol{r})\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\mp\psi^\dagger(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})\rangle$$

$$=\int d^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=1$$

7. (65), (66)式より

$$e^{-\beta\Phi_\lambda}=\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(K_0+\lambda H_1)}\right]$$

両辺を λ で微分すると，$\dfrac{\partial}{\partial\lambda}e^{a+\lambda b}=\displaystyle\int_0^{\lambda}e^{a+sb}be^{a+(1-s)b}ds$ を用いて

$$-\beta e^{-\beta\Phi_\lambda}\frac{\partial\Phi_\lambda}{\partial\lambda}=-\beta\,\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(K_0+\lambda H_1)}H_1\right]$$

$\langle\cdots\rangle_\lambda=e^{\beta\Phi_\lambda}\,\mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(K_0+\lambda H_1)}\cdots\right]$ であるから(67)が得られる。

8. 本文(40)式の導出法にならって $\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{R}}(t-t')$ を書き下すと

$$\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{R}}(t-t')=-i\theta(t-t')\sum_m\sum_n e^{-\beta K_n}\{\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle e^{-i(K_m-K_n)(t-t')/\hbar}$$
$$\mp\langle n|B|m\rangle\langle m|A|n\rangle e^{i(K_m-K_n)(t-t')/\hbar}\}$$
$$=-i\theta(t-t')\sum_m\sum_n e^{-\beta K_n}\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle$$
$$\times e^{-i(K_m-K_n)(t-t')/\hbar}\{1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)}\}$$

となるので，これの Fourier 変換をとると

$$\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{R}}(\omega)=\sum_m\sum_n e^{-\beta K_n}\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle\frac{1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)}}{\omega-(K_m-K_n)/\hbar+i\eta}$$

となる。同様にして

$$\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{A}}(\omega)=\sum_m\sum_n e^{-\beta K_n}\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle\frac{1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)}}{\omega-(K_m-K_n)/\hbar-i\eta}$$

となる。したがって(75)式の右辺は

$$\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{-i\omega(t-t')}\sum_m\sum_n e^{-\beta K_n}\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle\{1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)}\}$$
$$\times(-2\pi i)\delta\Bigl(\omega-\frac{1}{\hbar}(K_m-K_n)\Bigr)\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}\mp1}$$
$$=\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega(t-t')}\sum_m\sum_n e^{-\beta K_m}\langle m|B|n\rangle\langle n|A|m\rangle\delta\Bigl(\omega-\frac{1}{\hbar}(K_m-K_n)\Bigr)d\omega$$
$$=\sum_m\sum_n e^{-\beta K_m}\langle m|B|n\rangle\langle n|A|m\rangle e^{-i(K_m-K_n)(t-t')/\hbar}$$

と計算され，これは $\langle B(t')A(t)\rangle$ を書き下したものに他ならない。

9. $$\mathscr{G}_0(\boldsymbol{r}\tau;\boldsymbol{r}'\tau')=-\langle\mathrm{T}_\tau[\psi(\boldsymbol{r},\tau)\psi^\dagger(\boldsymbol{r}',\tau')]\rangle$$
$$=-\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'}\langle\mathrm{T}_\tau[a_{\boldsymbol{k}}(\tau)a_{\boldsymbol{k}'}{}^\dagger(\tau')]\rangle e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'}$$

であるから，$\tau>\tau'$ のときは 5 章の(125)式を使い，$\tau<\tau'$ のときは

$$\langle\mathrm{T}_\tau[a_{\boldsymbol{k}}(\tau)a_{\boldsymbol{k}'}{}^\dagger(\tau')]\rangle=\pm e^{-(\tau-\tau')\epsilon_{\boldsymbol{k}}/\hbar}\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}\frac{e^{-\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}}{1\mp e^{-\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}}$$

であることに注意すれば(80)式が得られる。

(38)式を使って Fourier 変換をすると，

$$\mathscr{G}_0(\boldsymbol{k},\omega_n)=-\frac{1}{1\mp e^{-\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}}\int_0^{\beta\hbar}d\tau e^{(i\omega_n-\epsilon_{\boldsymbol{k}}/\hbar)\tau}$$
$$=-\frac{1}{1\mp e^{-\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}}\frac{e^{i\omega_n\beta/\hbar}e^{-\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}}-1}{i\omega_n-\epsilon_{\boldsymbol{k}}/\hbar}$$

となるが，$e^{i\omega_n\beta_n/\hbar}=\pm1$ を用いれば(80′)が得られる。

10. (64)式で $\hbar\omega-\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}=\hbar\{G_\lambda(\boldsymbol{k},\omega)\}^{-1}+\hbar\Sigma_\lambda(\boldsymbol{k},\omega)$ と書けることに注意し，

$$\int_{-\infty}^{\infty}d\omega e^{i\eta}=0\qquad\text{(上半面で解析的な関数の積分である)}$$

を用いれば(94)式がすぐに得られる。(95)式も同様である。

演習問題 7.

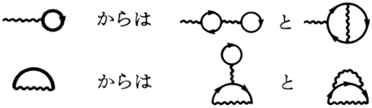
1. (1)式の $G(x,x')$ を t で微分し，(5)式を使うと

$$i\frac{\partial}{\partial t}G(x,x')=\delta(x-x')+\frac{1}{\hbar}h(\boldsymbol{r})G_0(x,x')+\int\{\delta(x-x_1)+\frac{1}{\hbar}h(\boldsymbol{r})G_0(x,x_1)\}\times\Sigma(x_1,x_1')G(x_1',x')d^4x_1d^4x_1'$$

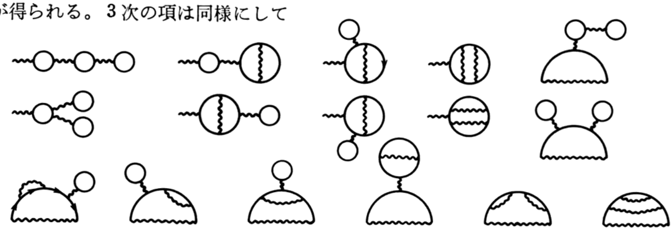
$$=\delta(x-x')+\frac{1}{\hbar}h(\boldsymbol{r})G(x,x')+\int\Sigma(x,x_1')G(x_1',x')d^4x_1'$$

となり，(6)式が得られる。

2. 7·1 図の実線の Green 関数は，自己エネルギー部分を含んでいるので，それをグラフにかけばよい。そのうち 2 次のものは



が得られる。3 次の項は同様にして



3.
$$G(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\boldsymbol{q}G(\boldsymbol{q})e^{i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \qquad ①$$

と書けば，(13)式より $G(\boldsymbol{q})$ の方程式として

$$(-q^2+k^2)G(\boldsymbol{q})=1$$

が得られる。これの解は

$$G_+(\boldsymbol{q})=\frac{1}{q^2-k^2+i\eta},\qquad \text{または}\quad G_-(\boldsymbol{q})=\frac{-1}{q^2-k^2-i\eta}$$

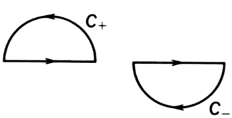
である。この $G_-(\boldsymbol{q})$ を①式に代入し，$\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'=\boldsymbol{R}$ とおき，$\boldsymbol{q}$ の方向について積分すれば

$$G_-(\boldsymbol{R})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\boldsymbol{q}\frac{-1}{q^2-k^2-i\eta}e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R}}=\frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty 2\pi q^2dq\frac{-1}{q^2-k^2-i\eta}\,\frac{e^{iqR}-e^{-iqR}}{iqR}$$

となるが，被積分関数は q の偶関数なので，積分範囲を $-\infty$ から ∞ にすることができる。そして $q^2-k^2+i\eta=(q-k-i\eta'\,\mathrm{sgn}\,q)(q+k-i\eta'\,\mathrm{sgn}\,q)$ と書けることを用いると

$$G_-(\boldsymbol{R})=\frac{1}{(2\pi)^2}\,\frac{-1}{4iR}\int_{-\infty}^{\infty}dq\left\{\frac{1}{q-k-i\eta'\,\mathrm{sgn}\,q}+\frac{1}{q+k-i\eta'\,\mathrm{sgn}\,q}\right\}(e^{iqR}-e^{-iqR})$$

となる。この積分で e^{iqR} については図の C_+ ように，e^{-iqR} については C_- のように積分路をとってその留数を計算する。{　}内の極は $q=k+i\eta'$，$q=-k-i\eta'$ にあるので，



$$G_-(\boldsymbol{R})=\frac{1}{(2\pi)^2}\,\frac{-2\pi i}{4iR}(e^{ikR}+e^{ikR})=\frac{-1}{4\pi}\,\frac{e^{ikR}}{R}$$

と(15)式が得られる。

$G_+(\boldsymbol{R})$ について同様な計算をすれば

$$G_+(\boldsymbol{R})=\frac{-1}{4\pi}\frac{e^{-ikR}}{R}$$

となることが示される(原点に向かって入ってくる球面波)。

4. (22)式で $p_1\to p_1-q$, $p_2\to p_2+q$ と書き直すと

$$Q(p_1+q,p_2-q\,;p_3,p_4)=(2\pi)^4\delta^{(4)}(p_1+q-p_3)+\frac{i}{\hbar}G_0(p_1+q)G_0(p_2-q)$$
$$\times\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}U(k)Q(p_1+q-k,p_2-q+k\,;p_3,p_4)$$

これに $U(q)$ を掛けて積分すると

$$\Gamma(p_1,p_2\,;p_3,p_4)=U(p_1-p_3)+\frac{i}{\hbar}\int\frac{d^4q}{(2\pi)^4}\int\frac{d^4k}{(2\pi)^4}U(q)G_0(p_1+q)G_0(p_2-q)$$
$$\times U(k)Q(p_1+q-k,p_2-q+k\,;p_3,p_4)$$

となるが，Γ の定義よりこれは(20)式に他ならない。

5. まず(33)式にある積分を書き直す。

$$\int\frac{d^3\boldsymbol{k}}{(2\pi)^3}u(\boldsymbol{k})\chi_0(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}'\,;P)$$
$$=(\epsilon-\boldsymbol{p}'^2+i\eta)\iint\frac{d^3\boldsymbol{k}d^3\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^6}u(\boldsymbol{k})\frac{\psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{k})\psi_{\boldsymbol{k}'}{}^*(\boldsymbol{p}')}{\epsilon-\boldsymbol{k}'^2+i\eta}$$
$$=(\epsilon-\boldsymbol{p}'^2+i\eta)\int\frac{d^3\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^3}\frac{k'^2-\boldsymbol{p}^2+i\eta'}{\epsilon-\boldsymbol{k}'^2+i\eta}\psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{p})\psi_{\boldsymbol{k}'}{}^*(\boldsymbol{p}')\qquad \text{〔(36)式より〕}$$
$$=(\epsilon-\boldsymbol{p}'^2+i\eta)\int\frac{d^3\boldsymbol{k}'}{(2\pi)^3}\left(\frac{\epsilon-\boldsymbol{p}^2+i\eta'}{\epsilon-\boldsymbol{k}'^2+i\eta}-1\right)\psi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{p})\psi_{\boldsymbol{k}'}{}^*(\boldsymbol{p}')$$
$$=-(\epsilon-\boldsymbol{p}'^2+i\eta)(2\pi)^3\delta^{(3)}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')+(\epsilon-\boldsymbol{p}^2+i\eta')\chi_0(\boldsymbol{p},\boldsymbol{p}'\,;P)$$

〔(37)式，(38)式より〕

この両辺を $(\epsilon-\boldsymbol{p}^2+i\eta)$ で割れば(33)式になる。

6. Boltzmann 統計における自由粒子の状態和 Z_N は

$$Z_N=\frac{2^N}{N!}\int\cdots\int d^3\boldsymbol{p}_1\cdots d^3\boldsymbol{p}_N d^3\boldsymbol{r}_1\cdots d^3\boldsymbol{r}_N\exp\left(-\beta\sum_j\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}_j{}^2\right)\frac{1}{h^{3N}}$$

(2^N はスピン自由度)

$$=\frac{2^N}{N!}\Omega^N\left(\frac{2\pi mk_{\mathrm{B}}T}{h^2}\right)^{3N/2}=\frac{1}{N!}\left(\frac{2\Omega}{\lambda^3}\right)^N$$

であるから，大きな状態和 Ξ は

$$\Xi=\sum_{N=0}^{\infty}e^{-\beta\mu N}Z_N=\exp\left(e^{-\beta\mu}\frac{2\Omega}{\lambda^3}\right)$$

と計算され，これから熱力学ポテンシャル Φ_0 は

$$\Phi_0=-k_{\mathrm{B}}T\log\Xi=-e^{-\beta\mu}\frac{2\Omega}{\lambda^3}k_{\mathrm{B}}T$$

と(75)式で与えられる。

7. 4 章(73)式は

$$a_{\boldsymbol{p}}=u_{\boldsymbol{p}}\alpha_{\boldsymbol{p}}-v_{\boldsymbol{p}}\alpha_{-\boldsymbol{p}}{}^\dagger,\quad a_{\boldsymbol{p}}{}^\dagger=u_{\boldsymbol{p}}\alpha_{\boldsymbol{p}}{}^\dagger-v_{\boldsymbol{p}}\alpha_{-\boldsymbol{p}}$$

であるから，$|0)$ が $\alpha_{\boldsymbol{p}}$ の真空であるとして

$$G_{11}(\boldsymbol{p},\omega)=(0|\mathrm{T}\,[a_{\boldsymbol{p}}(t)a_{\boldsymbol{p}}{}^\dagger(t')]|0)_\omega,\qquad G_{12}(\boldsymbol{p},\omega)=(0|\mathrm{T}\,[a_{\boldsymbol{p}}(t)a_{-\boldsymbol{p}}(t')]|0)_\omega$$

を計算すればよい〔$(\cdots)_\omega$ は Fourier 変換をとる意味〕。すると

$$G_{11}(\boldsymbol{p},\omega)=u_{\boldsymbol{p}}{}^2(0|\,\mathrm{T}\,[\alpha_{\boldsymbol{p}}(t)\alpha_{\boldsymbol{p}}{}^\dagger(t')]|0)_\omega+v_{\boldsymbol{p}}{}^2(0|\,\mathrm{T}\,[\alpha_{-\boldsymbol{p}}{}^\dagger(t)\alpha_{-\boldsymbol{p}}(t')]|0)_\omega$$

となるので，$\alpha_{\boldsymbol{p}}(t)=\alpha_{\boldsymbol{p}}e^{-iE_{\boldsymbol{p}}t/\hbar}$ を用いて(111)式が得られる。また

$$G_{12}(\boldsymbol{p},\omega)=-u_{\boldsymbol{p}}v_{\boldsymbol{p}}\{(0|\,\mathrm{T}\,[\alpha_{\boldsymbol{p}}(t)\alpha_{\boldsymbol{p}}{}^\dagger(t')]|0)_\omega+(0|\,\mathrm{T}\,[\alpha_{-\boldsymbol{p}}{}^\dagger(t)\alpha_{-\boldsymbol{p}}(t')]|0)_\omega\}$$

なので(112)式が得られる。

演習問題 8.

1. 電流 $\langle \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\rangle$ の式で，(57 a, b) にあげた以外の項は

$$\langle \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\rangle^{(1)}=-\frac{e\hbar}{im}\frac{2ie}{c\hbar}|\Delta(r)|^2\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar^3}\sum_{\omega_n}\iint d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2$$
$$\times\left\{\frac{\partial\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)}{\partial\boldsymbol{r}}\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})-\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\frac{\partial\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\right\}$$
$$\times\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \qquad ①$$

$$\langle \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\rangle^{(2)}=-\frac{e\hbar}{im}\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar^3}\sum_{\omega_n}\iint d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2$$
$$\times\left\{\frac{\partial\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)}{\partial\boldsymbol{r}}\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})-\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\quad)\frac{\partial\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\right\}$$
$$\times\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^{0}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)\left\{(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})\cdot\frac{\partial\Delta}{\partial\boldsymbol{r}}\Delta^*(\boldsymbol{r})+(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})\cdot\frac{\partial\Delta^*}{\partial\boldsymbol{r}}\Delta(\boldsymbol{r})\right\} \qquad ②$$

の二つである。$\left(\right.$他は $\dfrac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial\boldsymbol{r}}$ を含むか，$\dfrac{\partial\Delta}{\partial\boldsymbol{r}}$, $\dfrac{\partial\Delta^*}{\partial\boldsymbol{r}}$, $\boldsymbol{A}$ について 2 次以上である。$\left.\right)$

$\boldsymbol{r}_1$, $\boldsymbol{r}_2$ についての積分のうち，方向について平均すれば $\dfrac{\partial\mathscr{G}}{\partial\boldsymbol{r}}$ と $(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)$ や $(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})$ の方向がそろったものだけが残り，また②の｛　｝内は，$\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ の入れかえに対して符号を変えるから

$$\langle \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\rangle^{(1)}=-\frac{2e^2}{mc}|\Delta(r)|^2A(\boldsymbol{r})\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar^3}\sum_{\omega_n}\iint d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2$$
$$\times\left\{\frac{\partial\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)}{\partial\boldsymbol{r}}\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})-\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)\frac{\partial\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\right\}\cdot(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)$$
$$\times\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)\times\frac{1}{3}$$

$$\langle \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\rangle^{(2)}=-\frac{e\hbar}{im}\left\{\frac{\partial\Delta^*}{\partial\boldsymbol{r}}\Delta(\boldsymbol{r})-\Delta^*(\boldsymbol{r})\frac{\partial\Delta}{\partial\boldsymbol{r}}\right\}\frac{k_\mathrm{B}T}{\hbar^3}\sum_{\omega_n}\iint d^3\boldsymbol{r}_1d^3\boldsymbol{r}_2$$
$$\times\left\{\frac{\partial\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_1)}{\partial\boldsymbol{r}}\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})-\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})\frac{\partial\mathscr{G}_{\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})}{\partial\boldsymbol{r}}\right\}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_2)$$
$$\times\mathscr{G}_{-\omega_n}{}^{00}(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)\times\frac{1}{3}$$

となり，さらに $\langle \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})\rangle^{(1)}$ の｛　｝のすぐ後の $\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1$ を $(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r})-(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r})$ と書きかえて，｛　｝内が $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ の入れかえに対して符号を変えることに注意すれば，(59)式の C を用いて(58)式を得る。

2. (65)式の近似は，スピンに対する Hartree 近似ということができ，分子場近似も一種の Hartree 近似なので，似た結果が得られてもよさそうである。しかし Green 関数を使う方法では，異なるスピン間の相関が考慮に入っており，したがって 0 K でのスピン波のエネルギーは正しく与えているのに対し，ふつうの分子場近

似では各スピンは全く独立に取り扱っているので，(65)の近似よりも悪くなっているのである。

3. 数学的帰納法で証明する。まず $[S^+, S^z]=-S^+$ であるから(84)式は $n=1$ ではたしかに成立する。次に $n=n$ のとき(84)式が成り立つとして $[S^+, (S^z)^{n+1}]$ を計算する。これは

$$\begin{aligned}[S^+, (S^z)^{n+1}] &= [S^+, (S^z)^n]S^z+(S^z)^n[S^+, S^z]\\ &= \{(S^z-1)^n-(S^z)^n\}S^+S^z+(S^z)^n(-S^+)\\ &= \{(S^z-1)^n-(S^z)^n\}(S^zS^+-S^+)-(S^z)^nS^+\\ &= \{(S^z-1)^{n+1}-(S^z)^{n+1}\}S^+\end{aligned}$$

となり，(84)式の正しいことが示された。

演習問題 9.

1. (22)式を次のように書き直す。

$$\epsilon_\alpha{}^2=\frac{16\pi e^2}{\Omega q^2}\left\{\sum_{\boldsymbol{k}}{}'\,\omega_{\boldsymbol{q}}(\boldsymbol{k})+\frac{1}{\epsilon_\alpha{}^2}\sum_{\boldsymbol{k}}{}'\,\omega_{\boldsymbol{q}}{}^3(\boldsymbol{k})+\cdots\right\}$$

{ } 内第二項の ϵ_α には，第一項だけからきめた ϵ_α の値を代入する。すると(23)式を用いて

$$\epsilon_\alpha{}^2\simeq\hbar^2\omega_0{}^2+\frac{4m}{\hbar^2q^2N}\sum_{\boldsymbol{k}}{}'\,\omega_{\boldsymbol{q}}{}^3(\boldsymbol{k})$$

となるので，最後の和を計算すればよい。第一項と同様に

$$\sum_{\substack{|\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}\\|\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}|<k_{\mathrm{F}}}}(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}})^3=0\qquad(\boldsymbol{k}=-\boldsymbol{k}_1-\boldsymbol{q},\ \boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}=-\boldsymbol{k}_1\ \text{とおくと符号が変わる})$$

であるから，第二項の和は

$$\begin{aligned}\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}}(\epsilon_{\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}}-\epsilon_{\boldsymbol{k}})^3&=\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^3\{8(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q})^3+12q^2(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q})^2+6q^4(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{q})+q^6\}\\ &=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^3\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}}(4k^2q^4+q^6)\qquad(\text{方向について平均})\end{aligned}$$

q は小さいとして { } 内の第一項だけをとれば

$$\sum_{|\boldsymbol{k}|<k_{\mathrm{F}}}k^2=\frac{N}{2}\cdot\frac{3}{5}k_{\mathrm{F}}{}^2$$

であるから，次式を得る。

$$\epsilon_\alpha{}^2=\hbar^2\omega_0{}^2+\frac{3}{5}\left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^2k_{\mathrm{F}}{}^2q^2$$

$$\therefore\quad \epsilon_\alpha\simeq\hbar\omega_0\left\{1+\frac{3}{10}\left(\frac{\hbar k_{\mathrm{F}}}{m}\right)^2\frac{q^2}{\omega_0{}^2}\right\}=\hbar\omega_0\left(1+\frac{3}{10}\frac{v_{\mathrm{F}}{}^2q^2}{\omega_0{}^2}\right)$$

$$\left(v_{\mathrm{F}}=\frac{\hbar k_{\mathrm{F}}}{m}\ \text{は Fermi 面上での電子の速さ}\right)$$

2. 異なるスピン演算子は可換であるから，一つのスピン演算子について考えればよい。(50)式の状態 $|n\rangle=\dfrac{1}{\sqrt{n!}}\dfrac{1}{(2S)^{n/2}}(S^-)^n|0\rangle$ と，(51)式の状態 $|n)=\dfrac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0)$ とを比べると

$$S^-|n\rangle=\sqrt{n+1}\sqrt{2S}|n+1\rangle$$

であるから，(53 a)式と対応させればよいことはすぐわかる。次に S^z については

$$S^z|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{1}{(2S)^{n/2}}\{(S^-)^nS^z|0\rangle+[S^z,\ (S^-)^n]|0\rangle\}$$

$$=S|n\rangle+\frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{1}{(2S)^{n/2}}\{[S^z,\ S^-](S^-)^{n-1}+S^-[S^z,\ S^-](S^-)^{n-2}+\cdots$$

$$+(S^-)^{n-1}[S_z,\ S^-]\}|0\rangle$$

$$=S|n\rangle+\frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{1}{(2S)^{n/2}}(-n)(S^-)^n|0\rangle$$

$$=(S-n)|n\rangle$$

である。したがって $|n)$ に対して同じ行列要素をもつ演算子は，(53 b)式で与えられることがわかる。

S^+ に対しても同様で

$$S^+|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{1}{(2S)^{n/2}}[(S^-)^nS^++\{[S^+,\ S^-](S^-)^{n-1}+S^-[S^+,\ S^-](S^-)^{n-2}+\cdots$$

$$+(S^-)^{n-1}[S^+,\ S^-]\}]|0\rangle$$

$$=\frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{2}{(2S)^{n/2}}[(S^-)^{n-1}S^z\times n+\{[S^z,\ (S^-)^{n-1}]+S^-[S^z,\ (S^-)^{n-2}]+\cdots$$

$$+(S^-)^{n-2}[S^z,\ S^-]\}]|0\rangle$$

($S^+|0\rangle=0$, $[S^+,\ S^-]=2S^z$ を用いた)

$$=\frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{2}{(2S)^{n/2}}[nS(S^-)^{n-1}-\{(n-1)+(n-2)+\cdots+1\}(S^-)^{n-1}]|0\rangle$$

$$=\sqrt{2S}\sqrt{n}|n-1\rangle-\frac{n(n-1)}{2}\frac{1}{\sqrt{n}}\frac{2}{\sqrt{2S}}|n-1\rangle$$

となる。一方 $|n)$ に対しては

$$a|n)=\sqrt{n}|n-1),\qquad a^\dagger aa|n)=\sqrt{n}(n-1)|n-1)$$

であることを比べると(53 c)式の対応をさせればよいことがわかる。

演習問題 10.

1. $\dot{x}_\mu=\dfrac{i}{\hbar}[H,\ x_\mu]$ であるから，(24)式を使って

$$\dot{x}_{i\mu}=\frac{1}{m_i}\left\{p_{i\mu}-\frac{e_i}{c}A_\mu(\boldsymbol{r}_i)\right\}$$

これと $x_{j\nu}$ との交換関係は

$$[\dot{x}_{i\mu},\ x_{j\nu}]=\frac{1}{m_i}\frac{\hbar}{i}\delta_{\mu\nu}\delta_{ij}$$

2. 6-2 の議論をそのまま用いて

$$\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{R}}(t-t')=-i\theta(t-t')\frac{1}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}\{1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)}\}$$

$$\times\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(K_m-K_n)(t-t')\right\}$$

と書けるので，これの Fourier 変換は

$$\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{R}}(\omega)=\frac{1}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}(1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)})\frac{\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle}{\omega-(K_m-K_n)/\hbar+i\eta}$$

となる。A, B に対角部分がある場合，A, B は Bose 型演算子なので $1-e^{-\beta(K_m-K_n)}$ という因子を含み，$n=m$ の部分(対角部分)は $\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{R}}$ には寄与しない。一方(40)式の $\tilde{\mathscr{G}}_{AB}(\tau,\tau')$ は，$\tau>\tau'$ のとき

$$\tilde{\mathscr{G}}_{AB}(\tau,\tau')=-\frac{1}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle e^{(\tau-\tau')(K_n-K_m)/\hbar}$$

であり，これの Fourier 変換は

$$\tilde{\mathscr{G}}_{AB}(\omega_l)=\frac{1}{\Xi}\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle\frac{1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)}}{i\omega_l-(K_m-K_n)/\hbar}$$

となる。この場合 A, B の対角部分の寄与は $\omega_l=0$ に対してのみ寄与をもち，$\tilde{\mathscr{G}}$ と $\tilde{\mathscr{G}}^{\mathrm{R}}$ のスペクトルは原点において違うことになる。この差をなくすようにしたのが(40′)の $\mathscr{G}_{AB}(\tau,\tau')$ である。これは

$$\tilde{\mathscr{G}}_{AB}(\tau,\tau')=-\frac{1}{\Xi}\Big\{\sum_n\sum_m e^{-\beta K_n}\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle e^{(\tau-\tau')(K_m-K_n)/\hbar}$$
$$-\sum_n e^{-\beta K_n}\langle n|A|n\rangle\langle n|B|n\rangle\Big\}$$

$$\tilde{\mathscr{G}}_{AB}(\omega_l)=-\frac{1}{\Xi}\sum_{n\neq m}\sum e^{-\beta K_n}\langle n|A|m\rangle\langle m|B|n\rangle\frac{1\mp e^{-\beta(K_m-K_n)}}{i\omega_l-(K_m-K_n)/\hbar}$$

で与えられ，$\mathscr{G}_{AB}{}^{\mathrm{R}}$ のスペクトルと同じになる。

3. まず(51)式の第二項を計算すると

$$\left\{\int_0^\beta d\lambda\frac{1}{Z_0}\sum_\alpha\sum_{\alpha'}e^{-\beta E_\alpha{}^0}\langle\alpha|M_\nu|\alpha'\rangle\langle\alpha'|M_\mu|\alpha\rangle e^{\lambda(E_\alpha-E_{\alpha'})}-\beta\langle M_\nu\rangle_0\langle M_\mu\rangle_0\right\}H_\nu$$

$-\sum_\nu M_\nu H_\nu=H_1$, $M_\mu=B$ と書くと，これは

$$\frac{1}{Z_0}\sum_\alpha\sum_{\alpha'}\frac{e^{-\beta E_\alpha{}^0}-e^{-\beta E_{\alpha'}{}^0}}{E_\alpha{}^0-E_{\alpha'}{}^0}\langle\alpha|H_1|\alpha'\rangle\langle\alpha'|B|\alpha\rangle+\beta\langle H_1\rangle_0\langle M_\mu\rangle_0 \qquad ①$$

となる。ただし $\langle\Phi_{\alpha0}|\cdots|\Phi_{\alpha'0}\rangle=\langle\alpha|\cdots|\alpha'\rangle$ と書いた。他方(57)式の第一項は

$$\Delta\langle B\rangle(t)=\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^t\frac{1}{Z_0}\sum_\alpha\sum_{\alpha'}e^{-\beta E_\alpha{}^0}\{\langle\alpha|H_1|\alpha'\rangle\langle\alpha'|B|\alpha\rangle\exp\{-i(E_\alpha{}^0-E_{\alpha'}{}^0)(t-t')/\hbar\}$$
$$-\langle\alpha|B|\alpha'\rangle\langle\alpha'|H_1|\alpha\rangle\exp\{i(E_\alpha{}^0-E_{\alpha'}{}^0)(t-t')/\hbar\}$$
$$=\frac{1}{Z_0}\sum_{\alpha\neq\alpha'}\sum\frac{e^{-\beta E_\alpha{}^0}}{E_\alpha{}^0-E_{\alpha'}{}^0}\{\langle\alpha|H_1|\alpha'\rangle\langle\alpha'|B|\alpha\rangle+\langle\alpha|B|\alpha'\rangle\langle\alpha'|H_1|\alpha\rangle\}$$
$$=\frac{1}{Z_0}\sum_{\alpha\neq\alpha'}\sum\frac{e^{-\beta E_\alpha{}^0}-e^{-\beta E_{\alpha'}{}^0}}{E_\alpha{}^0-E_{\alpha'}{}^0}\langle\alpha|H_1|\alpha'\rangle\langle\alpha'|B|\alpha\rangle \qquad ②$$

と計算できる。ただし第一行目では $\alpha=\alpha'$ という項はないので，以下の和ではこの項を除いておいた。また $H_1(t_1)$ は $t'\to-\infty$ で $e^{\epsilon t'}$に 比例して 0 になるとしている。

②に(57)式の最後の項を加えれば，①の第一項に一致することが確かめられ，①の第二項と(57)式の第二項も同じものであるから，(51)式第二項と(57)式は同じになることが示された。

4. 磁場の方向を z 方向にとる。スピンによる磁気モーメントは

$$M_z=g\mu_{\mathrm{B}}\frac{1}{2}\sum_k(a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{k\uparrow}-a_{k\downarrow}{}^\dagger a_{k\downarrow})$$

$$M^+=M_x+iM_y=g\mu_{\mathrm{B}}\sum_k a_{k\uparrow}{}^\dagger a_{k\downarrow},\qquad M^-=M_x-iM_y=g\mu_{\mathrm{B}}\sum_k a_{k\downarrow}{}^\dagger a_{k\uparrow}$$

と書ける。$\langle M_\mu \rangle_0 = 0$, $\langle M_\mu M_\nu \rangle_0 = \langle M_\mu{}^2 \rangle_0 \delta_{\mu\nu}$ であることはすぐにわかる。

したがって

$$\langle M_\mu \rangle = \int_0^\beta d\lambda \langle M_z(-i\hbar\lambda) M_z \rangle_0 H_z \delta_{\mu z}$$

であり，これを $\langle M_z \rangle = \chi H_z$ と書くと

$$\chi = \frac{1}{4}(g\mu_{\rm B})^2 \beta \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\boldsymbol{k}'} \langle (a_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}\uparrow} - a_{\boldsymbol{k}\downarrow}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}\downarrow})(a_{\boldsymbol{k}'\uparrow}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}'\uparrow} - a_{\boldsymbol{k}'\downarrow}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}'\downarrow}) \rangle_0$$

$$= \frac{\beta}{4}(g\mu_{\rm B})^2 \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\boldsymbol{k}'} 2\{\langle n_{\boldsymbol{k}\uparrow} n_{\boldsymbol{k}'\uparrow} \rangle_0 - \langle n_{\boldsymbol{k}\uparrow} n_{\boldsymbol{k}'\downarrow} \rangle_0\}$$

となる。ただし $n_{\boldsymbol{k}\sigma} = a_{\boldsymbol{k}\sigma}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}\sigma}$ として，スピンの向き ↑, ↓ についての対称性を用いた。

自由電子では

$$\langle n_{\boldsymbol{k}\uparrow} n_{\boldsymbol{k}'\downarrow} \rangle_0 = \langle n_{\boldsymbol{k}\uparrow} \rangle_0 \langle n_{\boldsymbol{k}'\downarrow} \rangle_0$$
$$\langle n_{\boldsymbol{k}\uparrow} n_{\boldsymbol{k}'\uparrow} \rangle_0 = \langle n_{\boldsymbol{k}\uparrow} \rangle_0 \langle n_{\boldsymbol{k}'\uparrow} \rangle_0 - \langle a_{\boldsymbol{k}\uparrow}{}^\dagger a_{\boldsymbol{k}'\uparrow} \rangle_0 \langle a_{\boldsymbol{k}\uparrow} a_{\boldsymbol{k}'\uparrow}{}^\dagger \rangle_0$$

となるから

$$\chi = \frac{-\beta}{2}(g\mu_{\rm B})^2 \sum_{\boldsymbol{k}} f_{\boldsymbol{k}}(1 - f_{\boldsymbol{k}}), \qquad f_{\boldsymbol{k}} = \langle n_{\boldsymbol{k}\sigma} \rangle = 1/\{e^{\beta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)} + 1\}$$

と書くことができる。1 章でも述べたように

$$f_{\boldsymbol{k}}(1 - f_{\boldsymbol{k}}) = \frac{1}{(e^{\beta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)} + 1)(1 + e^{-\beta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)})}$$

は $\epsilon_{\boldsymbol{k}} \sim \mu$ の付近のみで大きい値をもつ関数なので低温 ($T \to 0$ K) では $-\frac{1}{\beta}\delta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)$ とすることができる。したがって $\sum_{\boldsymbol{k}} \longrightarrow \int \rho(\epsilon) d\epsilon$ とすると

$$\chi = \frac{1}{2}\rho(\epsilon_{\rm F})(g\mu_{\rm B})^2$$

となる。この等温帯磁率に対し，(56)式に対応する断熱帯磁率は 0 になる。これは今の場合 H_1 が H_0 と可換のため，波動関数は変化しないためで，統計的な重みを変えない限り物理量は変化しないからである。

索　引

高野文彦（たかのふみひこ） 略歴

1926年　長野県に生まれる
1949年　東京大学理学部物理学科卒業
1959年　理学博士
1964年　東京教育大学理学部助教授
1970年　東京教育大学理学部教授
1974年　筑波大学教授
1989年　大学入試センター副所長

主要著書

現代金属物理学シリーズ　金属の電子論II，第8章（アグネ社，1969年）
朝倉物理学講座　物質の構造II，第2，3章（朝倉書店，1965年）
超伝導現象（河出書房新社，1971年）

1975年4月10日　初版発行
1991年10月30日　初版第9刷発行

新物理学シリーズ 18

多体問題

著者　高野文彦
発行者　山本　格
発行所　株式会社 培風館
東京都千代田区九段南4-3-12・郵便番号102
電話(03)3262-5256(代表)・振替東京4-44725

葉山印刷組版・平文社印刷・三水舎製本

PRINTED IN JAPAN

ISBN4-563-02418-X C3342